



Thermodynamique des histoires et fluctuations hors d'équilibre

Vivien Lecomte

► To cite this version:

Vivien Lecomte. Thermodynamique des histoires et fluctuations hors d'équilibre. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2007. Français. NNT : 2007PA077011 . tel-00198144

HAL Id: tel-00198144

<https://theses.hal.science/tel-00198144>

Submitted on 16 Dec 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution| 4.0 International License

UNIVERSITÉ DE PARIS VII - U.F.R. DE PHYSIQUE

LABORATOIRE MATIÈRE ET SYSTÈMES COMPLEXES



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VII

Spécialité : **PHYSIQUE THÉORIQUE**

présentée par

Vivien LECOMTE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS VII

Sujet :

Thermodynamique des histoires et fluctuations hors d'équilibre

Jury composé de :

M. <i>Henk van Beijeren</i>	Rapporteur
M. <i>Giulio Biroli</i>	Examineur
M. <i>Pierre Gaspard</i>	Rapporteur
M. <i>Jorge Kurchan</i>	Président
M. <i>Satya Majumdar</i>	Examineur
Mme. <i>Noëlle Pottier</i>	Examineur
M. <i>Frédéric van Wijland</i>	Directeur de thèse

30 Mars 2007

Table des matières

Remerciements	vi
Introduction	ix
0.1 Décrire à différentes échelles	ix
0.2 Des fluctuations des configurations à celles des histoires	x
0.3 Plan	x
 I Thermodynamique des histoires	 1
1 Présentation de la thermodynamique des histoires	3
1.1 Motivations : construction de Boltzmann-Gibbs	3
1.2 Perspective historique	5
1.2.1 Formalisme thermodynamique de Ruelle	5
1.2.2 Approche de Gaspard : temps discret	6
1.2.3 Problème du passage du discret au continu	7
1.3 Construction pour les dynamiques markoviennes en temps continu	8
1.3.1 Nature des histoires	8
1.3.2 Fonction de partition de Ruelle	10
1.3.3 Entropie de Kolmogorov-Sinai	11
1.3.4 Interprétation en termes d'une observable	12
1.4 Généralisation à une observable A quelconque	13
1.4.1 Courants	13
1.4.2 Fonctions de grandes déviations	14
1.4.3 État stationnaire à valeur non nulle de s	16
1.4.4 Fonction Zêta	18
1.4.5 Une généralisation supplémentaire	18
1.5 Premiers exemples	19
1.5.1 Retour au formalisme thermodynamique	19
1.5.2 Cas du taux de sortie $r(\mathcal{C})$ constant	20
1.5.3 Un système ouvert : la marche aléatoire à conditions absorbantes	21
1.5.4 Le modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP)	22

1.5.5	Courant d'entropie	23
1.5.6	Entropie de Kolmogorov-Sinai renversée dans le temps	24
1.5.7	Variation d'entropie de Kolmogorov-Sinai	25
2	Approche en champ moyen	27
2.1	Cas général	27
2.1.1	Dynamique	27
2.1.2	Espace des spins, espace des aimantations	29
2.1.3	Énergie libre dynamique à l'ordre dominant	30
2.1.4	Interprétation de l'énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}_A(m, s)$	32
2.1.5	Formalisme d'opérateur	33
2.1.6	États cohérents de spin	34
2.1.7	Corrections de taille finie	35
2.2	Modèle d'Ising	37
2.2.1	Transition de phase thermodynamique	37
2.2.2	Énergie libre dynamique associée à Q_+	38
2.2.3	Énergie libre associée à K	41
2.2.4	Entropie de Kolmogorov-Sinai dans l'état stationnaire	45
2.2.5	Entropie de Kolmogorov-Sinai dépendante de l'état	45
2.3	Modèle de Potts	48
2.3.1	Dynamique	48
2.3.2	Thermodynamique des histoires associée à K	48
2.3.3	Brisure de symétrie	51
2.4	Processus de contact	51
2.4.1	Motivations	51
2.4.2	État stationnaire	52
2.4.3	Pression topologique	52
2.4.4	Thermodynamique des histoires associée à K	53
3	Grandes déviations en temps continu : méthode numérique	57
3.1	Description de la méthode	57
3.1.1	Motivations	57
3.1.2	Une évolution qui ne conserve pas la probabilité	58
3.1.3	Algorithme de clonage	59
3.1.4	Intégration thermodynamique	61
3.1.5	Une généralisation supplémentaire	61
3.2	Premiers exemples	61
3.2.1	Processus d'Exclusion Symétrique (SEP)	61
3.2.2	Processus d'Exclusion Asymétrique (ASEP)	62
3.2.3	Processus de Contact (CP) en dimension 1	64

4	Transition de phase dynamique dans les systèmes vitreux	67
4.1	Dynamiques cinétiquement contraintes	67
4.1.1	Motivations	67
4.1.2	Modèles cinétiquement contraints	68
4.2	Transition de phase dynamique	69
4.2.1	Résultats en dimension finie	69
4.2.2	Approche en champ moyen	72
II	Fluctuations de courant	77
5	Introduction aux grandes déviations de courant	79
5.1	Irréversibilité	79
5.2	Relations de fluctuation : galerie de portraits	80
5.2.1	Systèmes déterministes	80
5.2.2	Systèmes stochastiques décrits par une équation de Langevin	81
5.2.3	Processus de Markov	82
5.2.4	Relations apparentées et applications	82
5.3	Principe d'additivité	83
5.3.1	Notations	84
5.3.2	Principe d'additivité	84
5.3.3	Distribution du courant	85
6	Système de spin en contact avec deux bains thermiques	89
6.1	Introduction	89
6.1.1	Motivations	89
6.1.2	Système de spins	89
6.2	État stationnaire	90
6.2.1	Diagramme de phase	90
6.2.2	Courant d'entropie, courant d'énergie	90
6.2.3	État stationnaire hors d'équilibre	91
6.3	Grandes déviations du courant d'énergie	92
6.3.1	État- s associé au courant d'énergie Q	92
6.3.2	Fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$	93
7	Fluctuations dans le Processus d'Exclusion Symétrique	97
7.1	Introduction	97
7.1.1	Présentation du modèle	97
7.1.2	Motivations	98
7.2	Résultats exacts	99
7.2.1	Théorie de perturbation	99

7.2.2	Théorie de perturbation pour Q	101
7.2.3	Ansatz de Bethe pour Q (I)	102
7.2.4	Ansatz de Bethe pour K	103
7.2.5	Ansatz de Bethe pour Q (II)	105
7.2.6	Valeurs extrêmes de s pour K et Q	108
7.3	Approche de l'hydrodynamique fluctuante	110
7.3.1	Introduction	110
7.3.2	Fluctuations du nombre d'événements K	111
7.3.3	Effets de taille finie; fonction d'échelle pour $\psi_K(s)$	113
7.3.4	Fonction d'échelle pour $\psi_Q(s)$	114
7.4	Résumé	115
8	Systèmes superdiffusifs et fluctuations de courant	117
8.1	Introduction	117
8.1.1	Motivations	117
8.1.2	Systèmes étudiés	118
8.2	Fluctuations de courant	120
8.2.1	Action effective dans l'état- s	120
8.2.2	Particules diffusant dans un champ; équation de Burgers bruitée	121
8.2.3	Modèle diffusif en champ avec transition continue	122
8.2.4	Superdiffusion dans un champ de vitesse désordonné	122
8.2.5	Autre approche	123
8.3	Conclusions	124
9	Perspectives	127
9.1	Conclusions	127
9.2	Questions ouvertes	128
A	Sauts et temps d'attente markoviens en temps continu	129
A.1	Exponentielle ordonnée en temps	129
A.2	Application aux processus stochastiques	129
A.2.1	Équation maîtresse	129
A.2.2	Solution (1) : séquences de configurations quelconques	130
A.2.3	Solution (2) : séquences de configurations successivement distinctes	130
A.2.4	Évolution sans conservation de la probabilité	131
B	Moyenne à temps final et moyenne intégrée au cours du temps dans l'état-s	133
B.1	États propres	134
B.1.1	Définition	134
B.1.2	Valeur moyenne au temps final	134
B.1.3	Valeur moyenne intégrée au cours du temps (1)	134

B.1.4	Valeur moyenne intégrée au cours du temps (2)	135
B.1.5	Dans l'état stationnaire non-modifié	135
B.2	Bilan détaillé	136
B.2.1	Vecteurs propres à gauche et à droite	136
B.2.2	Perturbations au premier ordre en s	137
B.2.3	Une autre symétrie	137
B.2.4	Utilisation de la symétrie	138
B.3	Modèle A : état- s à tout temps intermédiaire	138
C	Opérateurs de spin et espace des aimantations	141
C.1	Espace des spins, espace des aimantations	141
C.1.1	Vecteur aimantation	141
C.1.2	Probabilité dans l'espace des aimantations	141
C.1.3	Vecteurs duaux	142
C.1.4	Action des opérateurs M^\pm sur les états $ M\rangle$	142
C.2	Description des systèmes de spin	143
C.2.1	Taux de transition	143
C.2.2	Équations d'évolution dans l'espace des aimantations	143
D	États cohérents de spin	145
E	Théorie de Donsker-Varadhan et énergie libre dynamique à la Landau	147
E.1	Donsker-Varadhan large deviation function	148
E.1.1	Énoncé du résultat	148
E.1.2	Lien avec l'approche opératorielle	148
E.2	Énergie libre dynamique de Landau à $s = 0$	149
E.3	Énergie libre dynamique de Landau pour s quelconque	150
F	Spectre d'un opérateur quadratique en a et a^\dagger	153
G	Ansatz de Bethe pour les modèles d'exclusion	155
H	Ansatz de Bethe continu	157
I	Théorie des perturbations pour un opérateur markovien	163
I.1	Notations	163
I.2	Perturbation au premier ordre	164
I.3	Perturbation au second ordre	164
I.4	Cas des taux de transition vérifiant le bilan détaillé	164
	Bibliographie	167
	Publications	175

Aux muses

Remerciements

Cette thèse s’est déroulée au Laboratoire de Physique Théorique de l’Université d’Orsay. Je remercie les deux directeurs successifs, Dominique Schiff et Henk Hilhorst de m’avoir accueilli au sein du labo, jusqu’à l’ultime déménagement. Je remercie également Jean-Marc di Meglio de m’avoir accepté au sein de mon labo d’attache, Matière et Systèmes Complexes, à l’unité en naissance.

Frédéric van Wijland a accepté d’encadrer mon travail durant ces trois ans. Son imagination impétueuse, sa volonté permanente de partage, son enthousiasme intangible m’ont fourni une énergie cyclopéenne pour progresser dans le domaine de la physique hors d’équilibre. Commencer une thèse c’est enfin se confronter à l’inconnu, accepter de ne pas comprendre, disposer d’une liberté qui ne saurait se passer de joie de la pensée scientifique. Fred m’a transmis celle-ci sans économiser sa disponibilité, son sens de l’esprit, sa patience à toute épreuve, et sa confiance.

Je ne peux imaginer meilleure thèse.

Durant mon travail, j’ai eu l’occasion d’apprendre et de collaborer avec de nombreux physiciens. Je tiens à remercier en premier lieu Cécile Appert-Rolland, avec qui j’ai eu le plaisir de coopérer durant une grande partie de ma thèse. Son arrivée à Orsay a été le point de départ d’un pan entier et inattendu de mon travail de thèse – preuve qu’en recherche il faut toujours s’attendre à l’imprévisible. Zoltán Rácz m’a initié à penser hors d’équilibre. Uwe Täuber m’a permis de travailler sur les systèmes superdiffusifs du point de vue de la théorie des champs. L’application de la thermodynamique des histoires aux systèmes vitreux doit énormément à Estelle Pitard et JuanPe Garrahan. Il m’a été très agréable de progresser en parallèle avec Julien Tailleur sur les grandes déviations, nos discussions fructueuses ont abouti à un algorithme qui a été essentiel pour toute une partie de mon travail. Enfin je ne saurais trop remercier Bernard Derrida, qui m’a suivi continûment au début de ma thèse lorsque je rédigeais les notes de son cours sur les systèmes hors d’équilibre, me donnant une impulsion initiale déterminante. En écho, j’ai tout dernièrement bénéficié de son expérience dans un travail commun sur les processus d’exclusion

Je remercie vivement Henk van Beijeren et Pierre Gaspard d’avoir accepté de rapporter ma thèse, ainsi que Giulio Biroli, Jorge Kurchan, Satya Majumdar et Noëlle Pottier d’être examinateurs. Je suis aussi redevable à de nombreuses personnes d’occasions de discuter certains points de mon travail, Gerard Barkema, Ludovic Berthier, Éric Bertin, Giulio Biroli,

Pierre Gaspard, Christian Giardiná, Peter Grassberger, Walter Kob, Alex Lefèvre, Satya Majumdar, Kirone Mallick, Cécile Monthus, Alberto Rosso, Herbert Spohn, et bien évidemment les (ex-)membres du groupe de physique statistique du LPT, Alain Barrat, Henk Hilhorst, Gregory Schehr, Emmanuel Trizac. Ma vision de la physique manquerait d'équilibre sans d'innombrables conversations avec Jorge Kurchan et Julien Tailleur, lors de mes visites à l'ESPCI. Nous autres apprentis étions finalement peu nombreux à Orsay mais je ne pourrai oublier mes interactions avec les autres étudiants et post-doc, Ignacio Alvarez-Hamelin, Luca dall'Asta, Thomas Delattre, Kristina van Duijvendijk, Aurélien Gautreau, Balázs Kozma, Mélanie Lebental, Thierry Mora, Andrea Puglisi, Paolo Visco, Lenka Zdeborova.

Je dois remercier Julien et Anne, pour leur amitié impérissable, Pierre pour de trop peu nombreux moments musicaux, Marie pour ses livres évadants, Marc et Léticia, colocataires d'exception, qui ont su me supporter dans diverses situations *auparavant* inimaginables.

Ma famille, Françoise, Patrick, Vincent, pour leur soutien, leur vie. Et dernièrement pour leurs innombrables lectures et relectures, suggestions opiniâtres.

Enfin, je ne saurais terminer sans un mot sur mon installation dans les nouveaux murs du laboratoire Matière et Systèmes Complexes, où la rédaction de cette thèse s'est déroulée. Je remercie en particulier Noëlle Pottier, Jean-Baptiste Fournier, avec qui j'ai partagé l'émotion de s'installer dans un labo tout neuf. *E ultimo ma non da meno*, pour leur force et leur présence humaines dans la période de convalescence qui suit celle de la rédaction, un immense merci aux plus-qu'acolytes alors en milieu, début ou fin de thèse, Franck, Kristina, Suzie.

Introduction

0.1 Décrire à différentes échelles

Lorsqu'on observe un système physique macroscopique, il est impossible en pratique de connaître expérimentalement l'état de chacun de ses constituants microscopiques, et l'on est en général restreint à la mesure de grandeurs (comme la température ou la pression) qui décrivent seulement les propriétés moyennes du système. La première thermodynamique, de Carnot, Thomson, Clausius a pour objet les “lois” qui décrivent les états macroscopiques de la matière. Sa construction, empirique, repose sur l'observation expérimentale systématique de phénomènes de changement d'état, de réactions chimiques, de transformation d'une forme d'énergie en une autre. La physique statistique a donné un cadre pour déduire les “principes” de cette première thermodynamique d'un ensemble de concepts plus fondamentaux. Sa construction par Boltzmann, Maxwell, Gibbs, Einstein, Ehrenfest repose sur le fait – historiquement, l'hypothèse – que la matière est formée à l'échelle microscopique de constituants élémentaires insécables. La remarque clef à la base de la physique statistique est qu'à un état macroscopique donné correspond une multitude d'états microscopiques différents, dont l'analyse au niveau théorique permet de retrouver la description moyenne de la thermodynamique classique.

Fondée sur une approche microscopique, la mécanique statistique permet naturellement d'accéder aux *fluctuations* des grandeurs mesurées, et de prédire de nouvelles lois qui les régissent. Très peu de temps après la formulation de cette théorie, Einstein [47] établit justement un lien entre fluctuation et dissipation, pour de petites particules en suspension dans une solution. Il donne au passage une première description microscopique du mouvement brownien. Même si les fluctuations que l'on peut observer dans ce genre de système macroscopique sont très faibles, elles sont néanmoins mesurables et Perrin, dès 1908, est capable de vérifier avec succès les prédictions d'Einstein, donnant du même pas de très forts arguments en faveur de l'hypothèse atomique¹.

¹Il est assez remarquable que les premières preuves de l'existence des atomes soient de nature statistique !

0.2 Des fluctuations des configurations à celles des histoires

De manière générale, une grande partie de l'information que l'on peut espérer obtenir sur un système se déduit de la distribution stationnaire $P(\mathcal{C})$ de ses configurations $\{\mathcal{C}\}$. Dans un système à l'équilibre thermodynamique, il existe même une manière très directe d'y accéder puisque $P(\mathcal{C})$ ne dépend que l'énergie $H(\mathcal{C})$ de la configuration. Pour un système en contact avec un thermostat de température $1/\beta$, on a par exemple

$$P(\mathcal{C}) \propto e^{-\beta H(\mathcal{C})} \quad (1)$$

Cependant, la connaissance de $P(\mathcal{C})$ ne dit rien sur les fluctuations des *histoires* suivies par le système². Ainsi, la construction de Boltzmann et Gibbs, bien que très générale, est utilisable seulement

- (i) pour décrire un système à l'équilibre (sans courant), et
- (ii) pour y étudier des observables *statiques* (comme l'énergie, le nombre de particules).

Restent inaccessibles par exemple la description des systèmes traversés par un courant d'énergie ou de particules, ou l'étude des fluctuations de courant dans un système à l'équilibre. L'analyse de telles situations est pourtant importante et on aimerait disposer d'une théorie plus générale.

Dans le cadre des systèmes dynamiques, Ruelle a ainsi proposé un “formalisme thermodynamique”, élaboré en analogie avec la physique statistique de Boltzmann. Sa construction consiste à remplacer l'étude des fluctuations des *configurations* d'un système par celle des fluctuations de ses *histoires*. Ce formalisme est très bien défini d'un point de vue mathématique, mais pour ainsi dire impossible à mettre en pratique dans des systèmes physiques.

La ligne directrice de cette thèse est la traduction d'une telle construction dans un cadre un peu différent, celui des systèmes stochastiques : l'idée centrale est de calquer la construction de Boltzmann-Gibbs, en partant du fait qu'à une histoire macroscopique correspondent de nombreuses histoires microscopiques.

0.3 Plan

La première partie de cette thèse est consacrée à la *thermodynamique des histoires* proprement dite, dont la construction est exposée au chapitre 1 – nous verrons qu'il s'agit essentiellement de déterminer certaines fonctions de grandes déviations. Le cas des systèmes de “dimension infinie” (décrits sur un graphe complet, et pour lesquels le champ moyen est exact) où toutes les quantités sont accessibles analytiquement, est étudié dans le chapitre 2 : nous montrons qu'il est possible de définir une notion assez originale d'énergie libre *dynamique* à la Landau-Ginzburg, qui donne accès à toutes les grandeurs du formalisme. La construction est illustrée sur des exemples présentant une transition de phase ou un état absorbant, dont

²On songe à certains systèmes unidimensionnels – le SEP et le TASEP – dont l'état stationnaire est le même en conditions aux limites périodiques (cf. paragraphe 1.5.4), mais dont la dynamique très différente.

l'influence sur la dynamique du système est mise en évidence. Dans le cas plus complexe des systèmes de dimension finie, on doit souvent se restreindre à des résultats numériques – un algorithme est détaillé dans le chapitre 3, fondé sur une approche directe en temps continu. De manière plus générale, il donne accès à n'importe quelle fonction de grandes déviations associée à une observable locale en temps, pour les systèmes markoviens en temps continu. Les résultats de la thermodynamique des histoires sur des modèles de systèmes vitreux, pour lesquels l'utilisation d'outils dynamiques est opportune, sont exposés dans le chapitre 4. Nous montrons que, dans la limite thermodynamique, l'état stationnaire des systèmes cinétiquement contraints se situe exactement au point critique d'une transition dynamique du premier ordre, justifiant l'image de séparation de phase employée pour décrire ces systèmes.

Dans la seconde partie, nous nous concentrons sur un cas particulier de la thermodynamique des histoires, l'étude des fluctuations de courant dans des systèmes à l'équilibre ou hors d'équilibre. Nous donnons au chapitre 5 les motivations de cette étude en rappelant brièvement diverses formes du théorème de fluctuation, et en exposant une méthode déjà existante (le “principe d'additivité”) qui permet dans certaines situations de déterminer les fonctions de grandes déviations associées au courant. En premier lieu (chapitre 6), nous examinons en détail les fluctuations du courant d'énergie dans un modèle de spins en interaction sur un graphe complet. Le système est porté très loin de l'équilibre au contact de deux bains thermiques différents et nous montrons comment étudier les fluctuations du courant, bien que le principe d'additivité ne puisse pas s'appliquer. Nous étudions au chapitre 7 un modèle unidimensionnel de particules en interaction (le processus d'exclusion symétrique), où nous déterminons analytiquement la fonction de grandes déviations du courant dans de nombreux régimes. De manière inattendue, il ressort que cette fonction est directement liée à la fonction de grandes déviations d'une autre observable (le nombre d'événements) par l'intermédiaire d'une fonction universelle commune, que nous déterminons. Au cours de cette étude, nous montrons en particulier comment utiliser de manière assez nouvelle le principe d'additivité – dans le cadre, équivalent, de l'hydrodynamique fluctuante – pour déterminer tous les cumulants du courant. Enfin, dans le chapitre 8, nous donnons quelques exemples d'utilisation des méthodes de renormalisation pour étudier les fluctuations de courant dans les systèmes superdiffusifs. Il apparaît qu'à grande échelle la fonction de grandes déviations acquiert un comportement d'échelle en loi de puissance, qui reflète les propriétés de diffusion anormale. Ces résultats permettent de caractériser différentes classes d'universalité dynamiques.

Première partie

Thermodynamique des histoires

Chapitre 1

Présentation de la thermodynamique des histoires

Nous présentons une méthode, dans l'esprit du formalisme thermodynamique de Ruelle [112], pour effectuer une analyse statistique des *histoires* suivies par un système stochastique. Ce travail a été effectué en collaboration avec Cécile Appert-Rolland et Frédéric van Wijland, et correspond aux publications **P2** et **P3**.

1.1 Motivations : construction de Boltzmann-Gibbs

En physique statistique d'équilibre, l'une des quantités non triviales les plus simples à définir est le nombre de configurations $\Omega(E, N)$ dans lesquelles un système de taille N et d'énergie fixée E peut se trouver

$$\Omega(E, N) = \sum_{\mathcal{C}} \delta(E - H(\mathcal{C})) \sim e^{Ns(e)} \quad \text{avec} \quad e = \frac{E}{N} \quad (1.1)$$

Pour les grands systèmes ($N \rightarrow \infty$), ce nombre se comporte exponentiellement en N et l'on appelle $s(e)$ l'entropie (intensive) correspondante, fonction de la densité d'énergie $e = E/N$. En théorie, on peut décrire toutes les propriétés macroscopiques reliées à E à partir du calcul de $s(e)$ – c'est le point de vue microcanonique. En pratique, il se révèle plus facile de se placer dans l'ensemble "canonique", où, au lieu de fixer exactement l'énergie E , on introduit un paramètre intensif β conjugué, qui fixe la valeur moyenne $e = E/N$ de E . La quantité associée à $\Omega(E, N)$ est la fonction partition du système $Z(\beta, N) = \sum_E \Omega(E, N)e^{-\beta E}$, qui s'écrit directement

$$Z(\beta, N) = \sum_E \Omega(E, N)e^{-\beta E} \sim e^{Nw(\beta)} \quad \text{pour} \quad N \rightarrow \infty \quad (1.2)$$

Elle se comporte aussi exponentiellement en N ce qui permet de définir la quantité intensive $w(\beta)$, indépendante de la taille du système, et directement reliée à l'énergie libre $f(\beta)$ par

$w(\beta) = -\beta^{-1}f(\beta)$. C'est la quantité centrale de la physique statistique d'équilibre (les transitions de phase apparaissent notamment comme des singularités de $f(\beta)$). L'entropie $s(e)$ se retrouve comme

$$s(e) = \max_{\beta} (\beta e - \beta f(\beta)) = \max_{\beta} (\beta e + w(\beta)) \quad (1.3)$$

La thermodynamique des histoires consiste à traduire cette construction pour rendre compte des fluctuations des histoires d'un système, au lieu de celles de ses configurations. Il s'agit de classer toutes les histoires que peut suivre un système sur une longue durée t en utilisant une grandeur $A[\text{hist}]$

- (i) qui dépend de l'histoire complète : $A = A[\text{hist}]$, au lieu de dépendre seulement de la configuration comme $H(\mathcal{C})$,
- (ii) qui est extensive en la durée t , tout comme l'énergie $H(\mathcal{C})$ est extensive en la taille du système.

Le nombre d'histoires suivies par le système avec une valeur donnée de A sur une durée t est (en posant $a = A/t$) :

$$\Omega(A, t) = \sum_{\substack{\text{histoires} \\ \text{de } 0 \text{ à } t}} \delta(A - A[\text{hist}]) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (1.4)$$

Dans les cas qui vont nous intéresser, il se trouve à nouveau plus facile de prendre un point de vue canonique, en introduisant un paramètre s intensif en temps, conjugué à A , qui fixe la valeur moyenne $a = A/t$ de A . La fonction de partition dynamique correspondante $Z(s, t) = \sum_A \Omega(A, t)e^{-sA}$ s'écrit

$$Z(s, t) = \sum_A \Omega(A, t)e^{-sA} \sim e^{t\psi_A(s)} \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (1.5)$$

Le lien entre l'entropie $\pi(a)$ et l'équivalent dynamique de l'énergie libre s'écrit à nouveau sous la forme d'une transformée de Legendre

$$\pi(a) = \max_s (\psi_A(s) + sa) \quad (1.6)$$

Remarquons par avance que dans les dynamiques stochastiques en temps continu, il sera nécessaire de modifier légèrement les définitions (1.4) et (1.5) pour tenir compte du nombre infini de trajectoires possibles (paragraphe 1.3.2).

En statistique d'équilibre, plusieurs observables – l'énergie, le nombre de particule, le volume – peuvent jouer le rôle de la quantité extensive E utilisée pour classer les configurations du système. En dynamique, le choix de la quantité A est tout aussi vaste : A peut représenter le courant total qui a traversé le système entre 0 et t , ou le nombre d'événements élémentaires dans l'histoire suivie, ou toute autre quantité extensive en temps. D'un point de vue historique, c'est la "complexité dynamique" de l'histoire qui a joué ce rôle en premier. Avant d'effectuer la construction détaillée de la thermodynamique des histoires pour les systèmes markoviens, nous allons brièvement rappeler certaines approches antérieures qui permettent de préciser la notion de complexité dynamique (partie 1.2). Nous reviendrons ensuite sur la thermodynamique des histoires construite à partir d'une quantité A quelconque (partie 1.4).

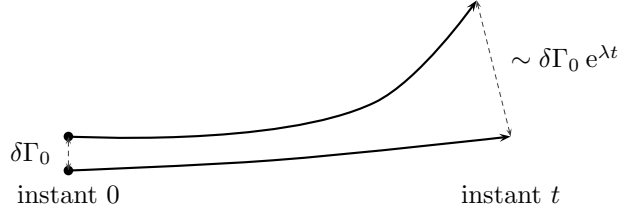


FIG. 1.1 – Séparation exponentielle de deux trajectoires initialement très proches

1.2 Perspective historique

1.2.1 Formalisme thermodynamique de Ruelle

L'idée initiale d'effectuer une statistique sur les histoires d'un système remonte à la construction par Ruelle du formalisme thermodynamique, dans le cadre des systèmes dynamiques déterministes [112]. Un système dynamique, décrit par un ensemble de coordonnées $\Gamma(t)$ dans l'espace des phases, évolue suivant

$$\frac{d\Gamma}{dt} = F(\Gamma) \quad (1.7)$$

La tendance du système à explorer son espace de phase peut s'étudier en suivant au cours du temps l'évolution de la séparation $\delta\Gamma(t)$ entre deux points infinitésimalement proches à l'état initial :

$$\frac{d\delta\Gamma}{dt} = \frac{\partial F}{\partial \Gamma} \delta\Gamma \quad (1.8)$$

La norme de $\delta\Gamma$ croît ou décroît exponentiellement en temps, et évolue suivant une équation similaire à (1.8). Moyennées dans l'état stationnaire, les valeurs propres de l'opérateur d'évolution correspondant permettent d'obtenir le spectre de Lyapounov $\{\lambda_i\}$ du système. Il y a autant d'exposants de Lyapounov que de dimensions dans le système. À chaque exposant de Lyapounov positif correspond une direction particulière instable dans l'espace de phase et un système qui possède au moins un $\lambda_i > 0$ est dit *chaotique*. Un autre outil est l'entropie de Kolmogorov-Sinai (KS) [89, 120], qui caractérise la chaoticité globale, plutôt qu'individuelle, de la dynamique. Pour la définir, on partitionne l'espace de phase en cellules discrètes, ce qui rend la dynamique probabiliste et permet de construire une mesure sur l'ensemble de toutes les trajectoires physiquement accessibles sur un intervalle de temps $[0, t]$ donné. L'entropie de Kolmogorov-Sinai h_{KS} est l'entropie de Shannon d'une telle mesure

$$h_{KS} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{\text{histoires de 0 à } t} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \ln \text{Prob}\{\text{histoire}\} \quad (1.9)$$

Cette définition inclut une moyenne sur l'ensemble des conditions initiales ainsi qu'une extrémalisation (supremum) par rapport à l'ensemble des partitions possibles de l'espace des phases. Par définition, h_{KS} donne une mesure de la complexité moyenne dans l'état stationnaire des trajectoires suivies par le système. Il est également possible de relier cette entropie

au spectre de Lyapounov de la dynamique : le théorème de Pesin affirme en effet que dans un système fermé¹

$$h_{\text{KS}} = \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i \quad (1.11)$$

Remarquons que cette entropie est de nature dynamique et n'est pas directement liée à l'entropie de Boltzmann-Gibbs du système. La fonction de partition dynamique, introduite par Ruelle [112], est définie comme²

$$Z_+(s, t) = \sum_{\substack{\text{histoires} \\ \text{de } 0 \text{ à } t}} (\text{Prob}\{\text{histoire}\})^{1-s} \sim e^{t\psi_+(s)} \quad (1.12)$$

À nouveau, cette définition comporte une moyenne sur les conditions initiales et un supremum sur l'ensemble des partitions possibles de l'espace des phases. L'équivalent de l'énergie libre, appelé *pression topologique*, est défini par

$$\psi_+(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln Z_+(s, t) \quad (1.13)$$

Cette fonction permet de retrouver l'entropie KS par $h_{\text{KS}} = \psi'_+(0)$ ou l'entropie topologique $h_{\text{top}} = \psi_+(1)$, qui donne une mesure du taux de croissance du nombre de trajectoires possibles au cours du temps³. C'est la quantité centrale du formalisme de Ruelle.

Notons déjà que l'on peut voir h_{KS} comme la valeur moyenne dans l'état stationnaire d'une quantité fluctuante (la complexité dynamique d'une histoire)

$$Q_+[\text{histoire}] = \ln \text{Prob}\{\text{histoire}\} \quad (1.14)$$

qui augmente linéairement en temps. On remarque que la fonction de partition dynamique $Z_+(s, t)$ de Ruelle est très proche de la quantité (1.5) pour l'observable $A = Q_+$. Mais avant cela, il faut donner une définition précise de $\text{Prob}\{\text{histoire}\}$, ce que nous allons faire dans le cadre des systèmes décrits par une dynamique markovienne.

1.2.2 Approche de Gaspard : temps discret

D'après les définitions précédentes, il existe une manière naturelle, comme l'explique Gaspard dans [64, 62, 65], d'étendre les notions d'entropie KS et de fonction de partition dynamique au cas des chaînes de Markov en temps discret. Considérons un processus de Markov

¹Dans un système ouvert, la probabilité n'est pas conservée, et on note γ le taux de perte de probabilité correspondant : $\sum_{\text{de } 0 \text{ à } t}^{\text{histoires}} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \sim e^{-\gamma t}$. L'entropie de Kolmogorov-Sinai est définie par

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \frac{\sum_{\text{de } 0 \text{ à } t}^{\text{histoires}} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \ln \text{Prob}\{\text{histoire}\}}{\sum_{\text{de } 0 \text{ à } t}^{\text{histoires}} \text{Prob}\{\text{histoire}\}} \quad (1.10)$$

et le théorème de Pesin s'énonce $h_{\text{KS}} = -\gamma + \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i$.

²Dans les notations historiques, $1 - s$ est noté β . L'avantage de notre changement de notation apparaîtra pour les dynamiques markoviennes, lorsqu'on exprimera $Z_+(s, t)$ comme la fonction génératrice des moments d'une observable.

³Dans un système ouvert, on a $\gamma = -\psi_+(0)$ et $h_{\text{KS}} = \psi'_+(0) - \gamma$.

qui décrit l'évolution d'un système entre ses différentes configurations $\{\mathcal{C}\}$ avec des probabilités de transition $w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$. La probabilité $P(\mathcal{C}, t)$ d'être dans la configuration \mathcal{C} à l'instant t obéit à l'équation d'évolution discrète

$$P(\mathcal{C}, t + \tau) - P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', t) - w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')P(\mathcal{C}, t)] \quad (1.15)$$

où τ représente le pas de temps (le temps écoulé s'écrit sous la forme $t = n\tau$). La probabilité d'une histoire $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n$ se déroulant entre 0 et $t = n\tau$, du type

$$(\mathcal{C}_0, 0; \mathcal{C}_1, \tau; \dots; \mathcal{C}_n, n\tau) \quad (1.16)$$

s'écrit

$$\text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) = P(\mathcal{C}_0, 0)w(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1) \dots w(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n) \quad (1.17)$$

Dans cette expression, deux configurations successives $\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k+1}$ peuvent tout à fait être égales. Par définition de l'entropie KS on a directement

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\tau} \sum_{\mathcal{C}_0, \dots, \mathcal{C}_n} \text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) \ln \text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_n) \quad (1.18)$$

On voit alors facilement [65] que cette expression se simplifie pour donner

$$\begin{aligned} h_{\text{KS}} &= -\frac{1}{\tau} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} P_{\text{st}}(\mathcal{C}) w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \\ &= -\frac{1}{\tau} \left\langle \sum_{\mathcal{C}'} w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \right\rangle_{\text{st}} \end{aligned} \quad (1.19)$$

où $P_{\text{st}}(\mathcal{C})$ est l'état stationnaire markovien. De nombreux calculs explicites de cette quantité ont été effectués dans Dorfman [45] ou Gaspard [64].

1.2.3 Problème du passage du discret au continu

On aimerait prendre la limite du temps continu $\tau \rightarrow 0$ dans (1.19). Les probabilités de transition $w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ entre configurations s'expriment en fonction du pas de temps τ et des *taux* de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ selon :

$$w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \begin{cases} \tau W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') & \text{si } \mathcal{C} \neq \mathcal{C}' \\ 1 - \tau \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'') & \text{si } \mathcal{C} = \mathcal{C}' \end{cases} \quad (1.20)$$

de sorte que l'équation maîtresse discrète (1.15) redonne son analogue en temps continu à la limite $\tau \rightarrow 0$:

$$\partial_t P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', t) - W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')P(\mathcal{C}, t)] \quad (1.21)$$

En suivant Gaspard, [63, 65], l'entropie KS définie dans (1.19) s'écrit en terme des taux de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$:

$$h_{\text{KS}} = - \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} P_{\text{st}}(\mathcal{C}) W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln(\tau W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')) \quad (1.22)$$

Il apparaît clairement que la limite continue $\tau \rightarrow 0$ dans (1.22) n'existe pas, à cause du terme divergent en $\ln \tau$. Comme les taux de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ sont dimensionnés et qu'il n'y a pas *a priori* d'échelle de temps disponible, on ne peut pas éliminer la divergence en gardant seulement le terme fini dans (1.22), car l'argument du logarithme doit rester sans dimension.

L'exemple très simple de la marche aléatoire unidimensionnelle est déjà affecté par ce problème. En notant p (respectivement q, r) les probabilités de saut vers la gauche (resp. vers la droite, de ne pas sauter) l'entropie KS correspondante s'écrit

$$h_{\text{KS}} = -\frac{1}{\tau} [p \ln p + q \ln q + r \ln r] \quad (1.23)$$

À la limite du temps continu, les probabilités p et q sont proportionnelles à τ et tendent vers 0, ce qui donne comme attendu un h_{KS} mal défini.

Il en est *a fortiori* de même pour la fonction de partition dynamique. De manière plus générale, on voit qu'il est préférable pour éviter ces problèmes de repartir des définitions même et de construire une approche intrinsèquement en temps continu.

1.3 Construction pour les dynamiques markoviennes en temps continu

1.3.1 Nature des histoires

Considérons un système décrit par une dynamique de Markov, de taux de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ entre configurations différentes. La probabilité $P(\mathcal{C}, t)$ d'être dans l'état \mathcal{C} à l'instant t évolue suivant l'équation maîtresse (1.21), qui s'écrit aussi

$$\partial_t P = \mathbb{W}P \quad (1.24)$$

où l'opérateur d'évolution \mathbb{W} a pour éléments

$$(\mathbb{W})_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \quad (1.25)$$

et

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (1.26)$$

est le taux de saut de la configuration \mathcal{C} vers une autre configuration (que nous appellerons taux d'échappement de \mathcal{C}). Les histoires suivies par le système peuvent être vues comme le résultat de deux processus aléatoires distincts (voir figures 1.2 et 1.3) :

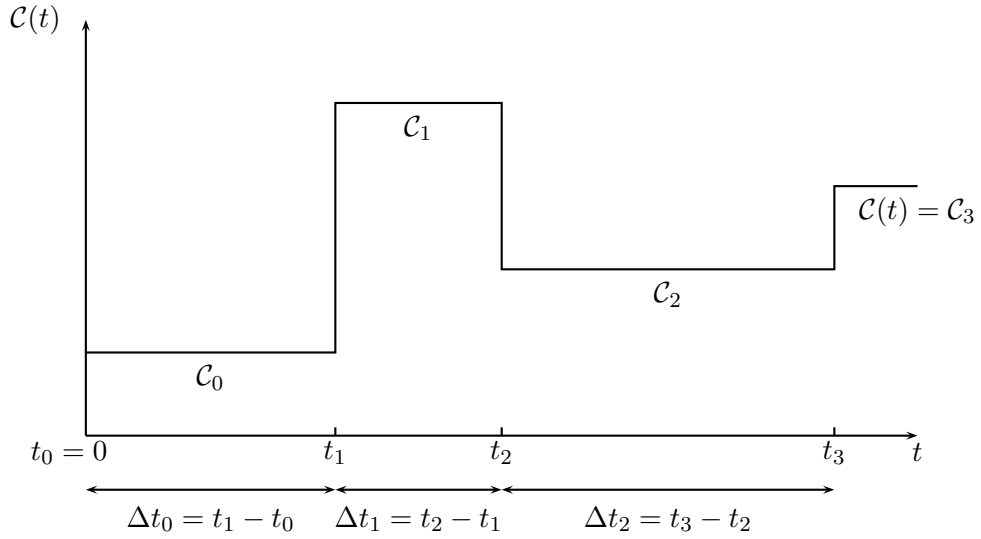


FIG. 1.2 – Une trajectoire typique pour une dynamique markovienne en temps continu : les intervalles de temps $t_{k+1} - t_k$ entre les changements de configuration sont distribués suivant une loi de Poisson de paramètre $r(\mathcal{C}_k)$. À chaque changement de configuration, le système saute de \mathcal{C}_k vers une autre configuration \mathcal{C}_{k+1} avec probabilité $\frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}$.

- (i) Le système passe par une séquence $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$ de configurations successivement distinctes. Chaque saut de \mathcal{C}_k à \mathcal{C}_{k+1} s'effectue avec une probabilité $\frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}$.
- (ii) Entre chaque changement de configuration, le système reste dans la configuration \mathcal{C}_k pendant un intervalle de temps $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$ qui est distribué avec une loi poissonnienne de paramètre $r(\mathcal{C}_k)$ (défini à l'équation 1.26)

$$\rho(\mathcal{C}_k, \Delta t) = r(\mathcal{C}_k) e^{-\Delta t r(\mathcal{C}_k)} \quad (1.27)$$

Une différence importante avec les séquences de configurations en temps discret (cf. éq. 1.17) est que dans cette description les configurations successives sont différentes par construction. La probabilité d'une telle séquence, indépendamment des temps de sauts, s'écrit

$$\text{Prob}\{\text{histoire}\} = \prod_{k=0}^{K-1} \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)} \quad (1.28)$$

où K est le nombre de changements de configuration (voir figure 1.3). La densité de probabilité des instants $\{t_k\}_{1 \leq k \leq K}$ de changement de configuration est

$$\prod_{k=0}^{K-1} \rho(\mathcal{C}_k, t_{k+1} - t_k) \quad (1.29)$$

Cette représentation des trajectoires d'une dynamique markovienne est décrite dans Van Kampen [85]. On peut la retrouver facilement à partir d'une transformation de l'équation

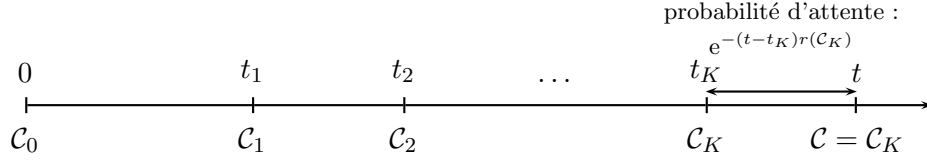


FIG. 1.3 – Une réalisation donnée d’une histoire de configurations $C_0 \rightarrow \dots \rightarrow C_K$. Entre les instants t_k et t_{k+1} , le système reste dans la configuration C_k .

maîtresse où l’on sépare à la main les termes de gain (absence de saut de configuration) et de perte (saut de configuration) de probabilité (cf. annexe A). Explicitement :

$$P(C, t | C_0, t_0) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{C_1, \dots, C_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(C_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(C_{K-1}, t_K - t_{K-1}) e^{-(t-t_K)r(C_K)} \left[\prod_{k=1}^K \frac{W(C_{k-1} \rightarrow C_k)}{r(C_{k-1})} \right] \quad (1.30)$$

Dans cette expression, le dernier terme exponentiel $e^{-(t-t_K)r(C_K)}$ représente la probabilité de ne pas sauter de $C = C_K$ entre t_K et t (cf. figure 1.3).

1.3.2 Fonction de partition de Ruelle

Avant de choisir un nouveau point de vue qui donne une entropie KS et une pression topologique bien définies, on peut d’abord expliciter la source des difficultés de la discrétisation en temps. Sans discrétisation temporelle, les intervalles de temps Δt_k entre les sauts sont distribués continûment. Ainsi, en appliquant mot pour mot la construction de Boltzmann-Gibbs du paragraphe 1.1 à une dynamique markovienne continue en temps et discrétisée par un pas de temps τ , on voit d’après (1.4) que le nombre $\Omega(Q_+, t)$ d’histoires du type (1.16) donnant au temps $t = n\tau$ une valeur fixée de Q_+ tend vers l’infini à la limite $\tau \rightarrow 0$, même pour t fini. Il en est de même pour la fonction de partition dynamique correspondante (1.5) et donc pour l’entropie KS (1.22). En termes imagés, la complexité dynamique de l’histoire est infinie à la limite $\tau \rightarrow 0$, car il y a besoin d’une information infinie pour représenter les temps de saut, répartis continûment entre 0 et t [68].

Pour dépasser cette difficulté, une alternative consiste à se concentrer sur la probabilité des histoires $C_0 \rightarrow \dots \rightarrow C_K$ seulement dans l’espace des configurations. Dans cette optique, la distribution de probabilité des intervalles de temps Δt_k entre les sauts intervient seulement comme moyenne extérieure, et joue un rôle similaire à la moyenne sur les conditions initiales présente dans les définitions (1.9) et (1.12) de h_{KS} et $Z_+(s, t)$ dans le contexte des systèmes dynamiques déterministes. Ce changement de point de vue est dans l’esprit de l’approche développée par Van Beijeren, Dorfman et collaborateurs [12, 92] pour le gaz de Lorentz et le billard de Sinai.

Explicitement, cela consiste à interpréter la définition de la fonction de partition dynamique (1.12) comme

$$Z_+(s, t) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(\mathcal{C}_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(\mathcal{C}_{K-1}, t_K - t_{K-1}) e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C}_K)} \left[\prod_{k=1}^K \frac{W(\mathcal{C}_{k-1} \rightarrow \mathcal{C}_k)}{r(\mathcal{C}_{k-1})} \right]^{1-s} \quad (1.31)$$

pour les dynamiques markoviennes. Seule la partie correspondant à la probabilité de la séquence de configuration $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$ est élevée à la puissance $1 - s$ (elle contient une information finie). Sans que cela nuise à la généralité, nous avons considéré que la condition initiale \mathcal{C}_0 est fixée.

1.3.3 Entropie de Kolmogorov-Sinai

Dans le même esprit que pour la fonction de partition dynamique, la définition (1.9) de l'entropie de Kolmogorov-Sinai s'interprète pour les dynamiques markoviennes en temps continu selon

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_{t_0}^t dt_1 \rho(\mathcal{C}_0, t_1 - t_0) \dots \int_{t_{K-1}}^t dt_K \rho(\mathcal{C}_{K-1}, t_K - t_{K-1}) e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C}_K)} \text{Prob}\{\text{histoire}\} \ln [\text{Prob}\{\text{histoire}\}] \quad (1.32)$$

où à nouveau la probabilité d'une histoire représente celle de la séquence de ses configurations, comme dans (1.28) :

$$\text{Prob}\{\text{histoire}\} = \prod_{k=0}^{K-1} \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)} \quad (1.33)$$

On retrouve le lien habituel entre h_{KS} et $Z_+(s, t)$:

$$h_{\text{KS}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left. \frac{\partial \ln Z_+(s, t)}{\partial s} \right|_{s=0} \quad (1.34)$$

Une première justification des définitions (1.31) et (1.32) est qu'elles donnent un résultat fini, indépendant de toute échelle de temps extérieure ou d'un choix particulier d'unité de temps. De plus, comme on le détaillera au paragraphe 1.5.6, l'entropie h_{KS} définie à partir de (1.31) est intimement liée au courant d'entropie [93] des processus de Markov en temps continu, exactement comme Gaspard l'avait montré pour le cas des dynamiques de Markov en temps discret [65].

Il faut souligner que les définitions que nous avons proposées ici diffèrent d'une lecture directe de celles des systèmes dynamiques. L'entropie de Kolmogorov originale correspond à une mesure sur les histoires, à la fois dans le temps et dans l'espace des configurations, ce qui la rend infinie [64] en temps continu (comme nous l'avons déjà signalé, il faut une information infinie pour décrire les intervalles qui séparent deux changements de configuration, car ils sont

distribués *continûment*). Elle ne permet donc pas de comparer deux processus de Markov en temps continu par l'étude de leurs entropies dynamiques, ce qui serait pourtant souhaitable dans l'absolu. Pour atteindre ce but, nous avons préféré focaliser la mesure des trajectoires sur l'information contenue dans les séquences de configurations visitées, donnant aux poids des intervalles temporels la forme d'une moyenne extérieure, selon la procédure exposée au paragraphe 1.3.2. Nous verrons sur de nombreux exemples que notre approche respecte l'esprit originel et le contenu physique du formalisme thermodynamique de Ruelle.

Il est également possible de faire un lien entre les approches en temps continu et en temps discret, en remarquant qu'entre chaque changement de configuration, il existe en vérité une unité de temps naturelle – bien que fluctuante –, donnée par $\tau_{\mathcal{C}} = 1/r(\mathcal{C})$ si le système est dans l'état \mathcal{C} . Toutefois, substituer τ par le bon $\tau_{\mathcal{C}}$ à chaque pas de temps dans l'écriture (1.18) de h_{KS} en temps discret ne redonne pas la même expression (1.32) qu'en temps continu. En effet, il reste que l'écriture (1.18) accorde autant d'importance aux pas de temps qui voient la configuration changer qu'à ceux qui ne la voient pas changer, contrairement à l'expression (1.32) en temps continu.

1.3.4 Interprétation en termes d'une observable

Comme esquissé à la fin du paragraphe 1.2.1, on peut exprimer la fonction de partition dynamique $Z_+(s, t)$ en termes d'une observable Q_+ extensive en temps. En définissant la complexité dynamique Q_+ d'une histoire

$$Q_+ = \sum_{k=0}^{K-1} \ln \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}, \quad (1.35)$$

telle que, dans l'espace des configurations

$$\text{Prob}\{\text{history}\} = e^{Q_+} \quad (1.36)$$

on identifie d'après (1.31) la fonction de partition $Z_+(s, t)$ à la fonction génératrice des moments de Q_+ :

$$Z_+(s, t) = \langle e^{-sQ_+} \rangle \quad (1.37)$$

La moyenne $\langle \cdot \rangle$ est la moyenne usuelle sur les histoires du processus stochastique, c'est-à-dire sur des configurations visitées et sur les intervalles de temps. Pour l'entropie KS, on remarque d'après (1.37) que

$$h_{\text{KS}} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle Q_+ \rangle \quad (1.38)$$

Enfin la pression topologique (ou pression de Ruelle) $\psi_+(s)$, définie comme

$$\psi_+(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln Z_+(s, t) \quad (1.39)$$

s'interprète comme la fonction génératrice des cumulants de la complexité dynamique :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_+^n \rangle_c}{t} = (-1)^n \left. \frac{d^n \psi_+}{ds^n} \right|_{s=0} \quad (1.40)$$

On voit de plus que l'entropie KS s'obtient à partir de ψ_+ selon

$$h_{\text{KS}} = \left. \frac{d\psi_+}{ds} \right|_{s=0}, \quad (1.41)$$

tout comme dans le formalisme original de Ruelle. La pression topologique s'interprète également comme le taux de croissance exponentiel de $Z_+(s, t) \sim e^{t\psi_+(s)}$. Ce type de propriété est en réalité générique de toutes les observables qui, comme Q_+ évoluent dans le temps par saut à chaque changement de configuration :

$$\begin{cases} \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}' \\ Q_+ \rightarrow Q_+ + \ln \frac{W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{r(\mathcal{C})} \end{cases} \quad (1.42)$$

Nous allons donc étudier de manière générale les fluctuations d'observables de même nature. Ceci permettra également de mieux comprendre comment adapter au temps continu les fonctions $\Omega(A, t)$ et $Z(s, t)$ définies lors de la construction de Boltzmann-Gibbs dynamique (paragraphe 1.1).

1.4 Généralisation à une observable A quelconque

1.4.1 Courants

Inspiré par la manière dont évolue Q_+ dans (1.42), nous allons étudier les fluctuations d'observables A , qui dépendent de l'histoire suivie par le système en évoluant à chaque changement de configuration sous la forme

$$\begin{cases} \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}' \\ A \rightarrow A + \alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \end{cases} \quad (1.43)$$

autrement dit, d'observables égales à une somme de contributions élémentaires $\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$ qui ne dépendent que des états visités

$$A[\text{hist}] = \sum_{k=0}^{K-1} \alpha(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k+1}) \quad (1.44)$$

C'est un type d'observable qui nous permettra d'effectuer la construction de Boltzmann-Gibbs dynamique du paragraphe 1.1. Le courant dans un système de particules, ou la complexité dynamique Q_+ font partie des exemples que nous étudierons. On peut également considérer des observables qui dépendent des intervalles de temps entre chaque saut (paragraphe 1.4.5). Pour une construction similaire dans le cadre des systèmes dynamiques, on consultera par exemple l'exposé de Gaspard [64, sec. 4.2].

L'étude des fluctuations de A se fait par l'étude de la probabilité jointe $P(\mathcal{C}, A, t)$ d'être dans la configuration \mathcal{C} à l'instant t en ayant observé une valeur A de l'observable (1.44). Cette quantité obéit à l'équation maîtresse

$$\partial_t P(\mathcal{C}, A, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', A - \alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C}), t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, A, t) \quad (1.45)$$

Comme première remarque, on peut vérifier que A se comporte linéairement en temps aux grands temps. Par définition, la moyenne $\langle A \rangle$ de A sur les histoires s'écrit au temps t comme $\langle A \rangle = \sum_{A, \mathcal{C}} A P(\mathcal{C}, A, t)$. On déduit de l'équation d'évolution (1.45) et de la définition (1.26) de $r(\mathcal{C})$ que

$$\partial_t \langle A \rangle = \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}') W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P(\mathcal{C}, t) \quad (1.46)$$

ainsi, dans l'état stationnaire, atteint aux grands temps,

$$\frac{1}{t} \langle A \rangle = \langle J_A \rangle \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (1.47)$$

où l'observable

$$J_A(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}') W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (1.48)$$

est statique (*i.e.* ne dépend pas de l'histoire, mais seulement de la configuration du système) et $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne dans l'état stationnaire.

On peut illustrer cette propriété sur la complexité dynamique : pour $A = Q_+$, les relations précédentes donnent l'entropie de Kolmogorov-Sinai

$$h_{\text{KS}} = -\frac{1}{t} \langle Q_+ \rangle = -\langle J_+ \rangle \quad (1.49)$$

comme moyenne dans l'état stationnaire de l'observable statique

$$J_+(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln \frac{W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{r(\mathcal{C})} \quad (1.50)$$

Cette expression est très proche de celle obtenue en temps discret (1.19), ce qui souligne le parallèle entre les deux approches. Le facteur $1/r(\mathcal{C})$ rend l'argument du logarithme sans dimension.

1.4.2 Fonctions de grandes déviations

Comme nous l'avons déjà remarqué, la quantité $\Omega(A, t)$ définie en (1.4), qui compte le nombre d'histoires pour lesquelles $A[\text{hist}] = A$, est infinie, tout comme la fonction de partition discrète (1.5) associée, ce qui empêche de déterminer l'entropie dynamique $\pi(A)$ et l'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$ associée. Pour adapter cette construction de Boltzmann-Gibbs aux dynamiques de Markov en temps continu, on est conduit comme pour $Z_+(s, t)$ à modifier les définitions (1.4) et (1.5) et, plus précisément, à changer légèrement de point de vue en s'intéressant aux quantités suivantes. L'équivalent de $\Omega(A, t)$ est la probabilité d'observer une valeur $A = at$ de l'observable A après un long temps t

$$P(A/t = a, t) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{pour } t \rightarrow \infty \quad (1.51)$$

La fonction $\pi(a)$ joue le rôle d'une "entropie dynamique" associée à A . Elle s'annule à son maximum a_{st} , qui correspond à la valeur de $\frac{1}{t} \langle A \rangle$ dans l'état stationnaire (voir figure 1.4). La

“fonction de partition dynamique” associée à $P(A/t = a, t)$ est $Z_A(s, t) = \sum_A P(A, t) e^{-sA}$, qui s’écrit encore⁴

$$Z_A(s, t) = \langle e^{-sA} \rangle \sim e^{t\psi_A(s)} \quad \text{pour} \quad t \rightarrow \infty \quad (1.52)$$

Dans la suite, les notations $Z_A(s, t)$ et $\psi_A(s)$ désignent les définitions (1.52) valides en temps continu.

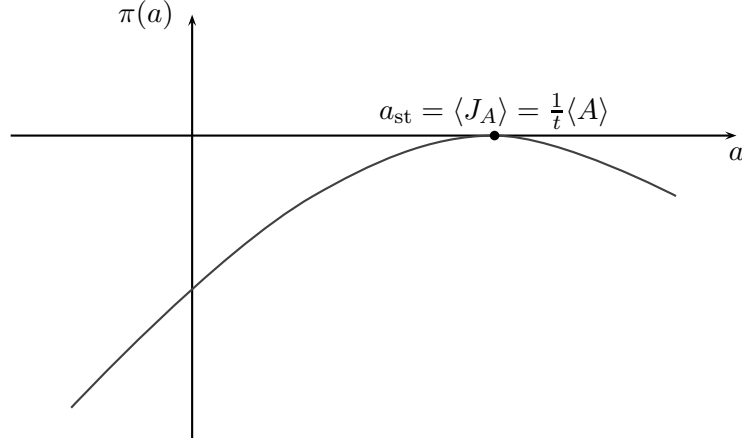


FIG. 1.4 – Fonction de grandes déviations $\pi(a)$ associée à $P(A/t = a, t)$.

Par extension, on appellera $\psi_A(s)$ “énergie libre dynamique” associée à A . Comme en physique statistique d’équilibre, il s’avère plus facile d’adopter une approche canonique (donnée par $\psi_A(s)$) que microcanonique (correspondant à $\pi(a)$). Le passage de l’une à l’autre de ces fonctions de grandes déviations s’effectue au moyen d’une transformation de Legendre

$$\psi_A(s) = \max_a (\pi(a) - sa) \quad (1.53)$$

$$= \pi(a^*) - sa^* \quad \text{avec} \quad \pi'(a^*) = s \quad (1.54)$$

ou encore, lorsque l’inversion est possible [48]

$$\pi(a) = \max_s (\psi_A(s) + sa) \quad (1.55)$$

$$= \psi_A(s^*) + s^*a \quad \text{avec} \quad \psi'_A(s^*) = -a \quad (1.56)$$

Ces fonctions de grandes déviations décrivent toutes les fluctuations de A dans l’état stationnaire :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle A^p \rangle_c = (-1)^p \left. \frac{d^p \psi_A(s)}{ds^p} \right|_{s=0}, \quad (1.57)$$

bien au delà des fluctuations gaussiennes. En plus d’une facilité de calcul, la fonction de partition dynamique $Z_A(s, t)$ et l’énergie libre $\psi_A(s)$ apportent aussi des informations sur les

⁴La comparaison entre (1.1-1.2), (1.4-1.5) et (1.51-1.52) éclaire d’une lumière originale l’hypothèse microcanonique de Boltzmann.

histoires atypiques suivies par le système. D'un point de vue formel, la fonction $\pi(a)$ sonde les histoires qui possèdent une *valeur fixée* a de A/t aux grands temps, tandis que l'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$ à s fixé caractérise les histoires qui possèdent une *valeur moyenne* de A/t égale à a , la correspondance entre a et s étant donnée par (1.54) ou (1.56) [cf. paragraphe 1.4.3]. En particulier, l'état stationnaire, pour lequel $a = a_{\text{st}} = \langle A \rangle/t$, est caractérisé par $s = 0$.

1.4.3 État stationnaire à valeur non nulle de s

On souhaite maintenant étudier les états à $s \neq 0$ explorés par la fonction de partition dynamique $Z_A(s, t)$. Le passage de $P(A, t)$ à $Z_A(s, t)$ faisait intervenir une transformation de Laplace. Celle-ci simplifie également l'équation d'évolution (1.45) de la probabilité jointe $P(\mathcal{C}, A, t)$. La transformée de Laplace

$$\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_A e^{-sA} P(\mathcal{C}, A, t) \quad (1.58)$$

obéit d'après (1.45) à l'équation d'évolution

$$\partial_t \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}', s, t) - r(\mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t), \quad (1.59)$$

qui s'écrit encore $\partial_t \hat{P}_A = \mathbb{W}_A \hat{P}_A$, l'opérateur \mathbb{W}_A ayant pour éléments

$$(\mathbb{W}_A)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} . \quad (1.60)$$

Pour $s \neq 0$, cet opérateur ne conserve pas la probabilité, car $(\mathbb{W}_A)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}} + \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} (\mathbb{W}_A)_{\mathcal{C}', \mathcal{C}} \neq 0$. L'équation d'évolution (1.59) est linéaire. On voit donc que $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ se comporte exponentiellement aux grands temps :

$$\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) \sim e^{t\psi_A(s)}, \quad (1.61)$$

où $\psi_A(s)$ est la plus grande valeur propre de \mathbb{W}_A . Il en est de même pour $Z_A(s, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$, ce qui justifie (1.52). La croissance ou décroissance exponentielle de $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ incite à définir l'état à s non nul (ou “état- s ”)

$$\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \frac{\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}{Z_A(s, t)} \sim e^{-t\psi_A(s)} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) \quad (1.62)$$

Les valeurs de $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ sont positives, car $P_A(\mathcal{C}, s, t)$, qui obéit à l'équation maîtresse (1.45), est positif à tout temps. Il en est de même pour $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)/Z_A(s, t)$. Après normalisation, l'état- s $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ représente bien une distribution de probabilité. La limite de grands temps donne l'état- s stationnaire $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$. Cet état est aussi le vecteur propre (normalisé) de \mathbb{W}_A associé à $\psi_A(s)$.

Cet état n'est pas le résultat d'une évolution qui conserve la probabilité dans l'espace des \mathcal{C} . On peut cependant l'obtenir comme le résultat de l'évolution en parallèle d'un *ensemble* de copies du système, munies d'une dynamique qui favorise l'observation de déviations de

A par rapport à sa moyenne ainsi que de règles de clonage qui reflètent la non-conservation de la probabilité (voir par exemple l'algorithme de par Giardinà, Kurchan et Peliti [67], ou celui proposé dans **P5** et détaillé au chapitre 3). Pour toute observable statique \mathcal{O} , la valeur moyenne de \mathcal{O} dans l'état- s à l'instant t , définie par

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(\mathcal{C}) \tilde{P}(\mathcal{C}, s, t) \quad (1.63)$$

est telle que, pour les trajectoires entre 0 et t

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(t)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (1.64)$$

Une construction similaire donne la mesure dans l'état- s d'observables qui dépendent de l'histoire complète du système. En particulier la valeur moyenne de l'observable A dans l'état- s est

$$\langle A \rangle_s = \frac{\langle A e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} = -\frac{\partial_s \langle e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \sim -\frac{\partial_s [e^{t\psi_A(s)}]}{e^{t\psi_A(s)}} \sim -t \psi'_A(s) \quad (1.65)$$

On voit donc que pour imposer une valeur *moyenne* donnée a de A/t dans l'état- s , il suffit de choisir le s^* conjugué à a par (1.56) (tout comme en thermodynamique d'équilibre le choix d'une température impose la valeur moyenne de l'énergie). De la même manière, aux grands temps, la valeur moyenne d'une observable dans l'état- s $\langle \mathcal{O} \rangle_s$ est égale à la valeur moyenne $\langle \mathcal{O} \rangle_a$ de \mathcal{O} pour les histoires telles que $A[\text{hist}] = at$, a et s étant toujours conjugués par (1.56) :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_a &\equiv \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(t) P(\mathcal{C}, A = at, t) \\ &= \sum_{\mathcal{C}, A} \mathcal{O}(t) P(\mathcal{C}, A, t) \delta(A - at) \\ &= \int ds \sum_{\mathcal{C}, A} \mathcal{O}(t) P(\mathcal{C}, A, t) e^{-sA + s a t} \\ &= \int ds \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(t) \hat{P}(\mathcal{C}, s, t) e^{s a t} \\ \langle \mathcal{O} \rangle_a &= \int ds \langle \mathcal{O} \rangle_s e^{[\psi_A(s) + s a] t} \end{aligned} \quad (1.66)$$

d'où l'interprétation annoncée, l'intégrale sur s étant dominée par la même valeur s^* que dans (1.56).

Une autre propriété particulière des état- s est que la moyenne intégrée au cours du temps et la moyenne au temps final ne sont pas égales (dès que $s \neq 0$). Plus précisément, si $\mathcal{O}(\mathcal{C})$ est une observable qui dépend de la configuration, on peut s'intéresser à deux manières de calculer la moyenne de \mathcal{O}

– soit au temps final

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(t)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (1.67)$$

– soit en effectuant une moyenne au long de l'évolution temporelle

$$\frac{1}{t} \left\langle \int_0^t \mathcal{O} \right\rangle_s = \frac{\left\langle \int_0^t d\tau \mathcal{O}(\mathcal{C}(\tau)) e^{-sA} \right\rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (1.68)$$

Dans l'état stationnaire non-modifié ($s = 0$), ces deux moyennes coïncident aux grands temps. En revanche, dès que $s \neq 0$, on peut voir de manière générale que ces deux quantités sont différentes (*cf.* l'annexe B pour des exemples). De manière plus générale, on peut définir une moyenne à temps intermédiaire $0 \leq \tau \leq t$

$$\langle \mathcal{O}(\tau) \rangle_s = \frac{\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}(\tau)) e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (1.69)$$

où $\langle \cdot \rangle$ a toujours lieu sur toutes les histoires entre 0 et t .

Dans l'annexe B, on détaille un exemple de système de particules où l'on peut déterminer la densité $\langle \rho(\tau) \rangle_s$ à tout temps intermédiaire. Elle possède un régime transitoire initial (qui dépend des conditions initiales), mais également un *régime transitoire final*, qui décrit la transition d'un régime “stationnaire” intermédiaire vers l'état- s à temps final. Il correspond aux configurations visitées par le système pendant une longue période avant de d'adopter sa configuration finale.

1.4.4 Fonction Zêta

Aux fonctions de partition $Z_A(s, t)$ sont associées les fonctions Zêta, transformées de Laplace de $Z_A(s, t)$ par rapport au temps :

$$\mathcal{Z}_A(s, z) = \int_0^\infty dt e^{-zt} Z_A(s, t) \quad (1.70)$$

La fonction $\mathcal{Z}_A(s, z)$ est analytique sur le plan complexe de la variable z , sauf en certains pôles. L'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$ correspond au pôle le plus proche de 0. D'après (1.52), $Z_A(s, t)$ s'écrit explicitement [*cf.* l'expression (A.23) en annexe] sous forme d'une somme d'intégrales temporelles convoluées, qui se factorisent après transformation de Laplace pour donner

$$\mathcal{Z}_A(s, z) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \frac{1}{z + r(\mathcal{C}_K)} \prod_{k=0}^{K-1} \frac{e^{-s \alpha(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k+1})} W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{z + r(\mathcal{C}_{k+1})} \quad (1.71)$$

Dans certains systèmes on accède plus facilement à l'énergie libre dynamique en utilisant cette expression. La fonction Zêta de Ruelle (paragraphe 1.5.1) est la fonction Zêta associée à la fonction de partition dynamique $Z_+(s, t)$.

1.4.5 Une généralisation supplémentaire

Jusqu'à présent nous avons considéré des observables qui dépendent de l'histoire du système seulement par la séquence des configurations visitées. Une forme plus générale d'observ-

able, toujours locale en temps, est donnée par

$$B[\text{hist}] = \sum_{k=0}^{K-1} \alpha(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_{k+1}) + \int_0^t dt b(\mathcal{C}(t)) \quad (1.72)$$

où $b(\mathcal{C})$ est une fonction de la configuration. Les observables de ce type sont utiles si l'on cherche par exemple à classifier les histoires du système en fonction de l'intégrale temporelle d'une quantité statique. D'autre part, la forme (1.72) permet de faire le lien avec certaines observables étudiées dans le cadre des systèmes dynamiques, comme le taux d'expansion dans l'espace de phase, intégré temporellement [69, 13]. En utilisant les résultats de l'annexe A et l'écriture

$$\int_0^t dt b(\mathcal{C}(t)) = \sum_{k=0}^{K-1} (t_{k+1} - t_k) b(\mathcal{C}_k) + (t - t_K) b(\mathcal{C}_K) \quad (1.73)$$

on voit que la fonction de partition dynamique $Z(s, t) = \langle e^{-sB} \rangle$ se comporte à nouveau en $e^{t\psi_B(s)}$, où l'énergie libre dynamique $\psi_B(s)$ est la valeur propre maximale de l'opérateur d'éléments

$$(\mathbb{W}_B)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} - [r(\mathcal{C}) + s b(\mathcal{C})] \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} . \quad (1.74)$$

Pour l'observable B , les parties diagonale et non diagonale de l'opérateur d'évolution markovien (1.25) sont modifiées. La fonction Zêta correspondante $\mathcal{Z}_B(s, z)$ possède la même expression (1.71) que $\mathcal{Z}_A(s, z)$, en y substituant $r(\mathcal{C})$ par $r(\mathcal{C}) + s b(\mathcal{C})$.

On peut également retrouver ce résultat en s'intéressant à la probabilité $P(\mathcal{C}, B, t)$ d'être dans la configuration \mathcal{C} à l'instant t après avoir mesuré une valeur B de l'observable extensive en temps (1.72). Cette probabilité évolue suivant

$$\partial_t P(\mathcal{C}, B, t) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', B - \alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C}), t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, B, t) - b(\mathcal{C}) \frac{\partial}{\partial B} P(\mathcal{C}, B, t) \quad (1.75)$$

Sa transformée de Laplace $\hat{P}_B(\mathcal{C}, s, t) = \int dB e^{-sB} P(\mathcal{C}, B, t)$ vérifie donc

$$\partial_t \hat{P}_B(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{\mathcal{C}'} e^{-s\alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_B(\mathcal{C}', s, t) - [r(\mathcal{C}) + s b(\mathcal{C})] \hat{P}_B(\mathcal{C}, s, t) \quad (1.76)$$

Cette évolution correspond bien à celle de l'opérateur (1.74).

1.5 Premiers exemples

1.5.1 Retour au formalisme thermodynamique

La pression topologique $\psi_+(s, t)$ apparaît comme la valeur propre maximale de l'opérateur \mathbb{W}_A associé à $A = Q_+$, qui s'écrit explicitement

$$(\mathbb{W}_+)_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})^{1-s} r(\mathcal{C}')^s - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} . \quad (1.77)$$

Cet opérateur est l'analogie stochastique de l'opérateur de Perron-Frobenius pour les systèmes dynamiques, dont la pression topologique est également la valeur propre maximale [64, section 4.5]. La fonction Zêta de Ruelle s'écrit

$$\mathcal{Z}_+(s, z) = \sum_{K=0}^{+\infty} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \frac{1}{z + r(\mathcal{C}_K)} \prod_{k=0}^{K-1} \frac{r^s(\mathcal{C}_k) W^{1-s}(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{z + r(\mathcal{C}_k)} \quad (1.78)$$

On trouvera dans [12] un exemple d'utilisation de ce type de relation pour le gaz de Lorentz.

1.5.2 Cas du taux de sortie $r(\mathcal{C})$ constant

Il existe une situation particulièrement simple pour les fluctuations de Q_+ et le calcul de $\psi_+(s)$: celle des systèmes dont les taux de transition sont uniformes dans l'espace des configurations ($W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = W$). Le taux d'échappement $r = r(\mathcal{C})$ est indépendant de \mathcal{C} et on trouve que la pression topologique prend une forme poissonnienne

$$\psi_+(s) = r \left[\left(\frac{r}{W} \right)^s - 1 \right] \quad (1.79)$$

Ce résultat peut s'obtenir en déterminant la plus grande valeur propre de l'opérateur de Perron-Frobenius (1.77), ou par le calcul direct suivant. Dans la définition (1.31) de la fonction de partition dynamique $Z_+(s, t)$, la probabilité d'une histoire de configurations $\text{Prob}[\text{hist}] = e^{Q_+}$ ne dépend de la suite de configurations visitées $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$ que par l'intermédiaire du nombre K de configurations visitées : $e^{Q_+} = \left(\frac{W}{r} \right)^K$. Ainsi, le facteur e^{Q_+} est entièrement découplé de la moyenne sur les instants de saut t_0, \dots, t_K . La probabilité de ces t_k est $e^{-rt} \frac{(rt)^K}{K!}$. Au total, indépendamment de la configuration initiale, $Z_+(s, t)$ prend ainsi la forme simple :

$$Z(s, t) = \sum_{K=0}^{+\infty} \underbrace{\left(\frac{r}{W} \right)^K}_{\text{nombre d'histoires}} \underbrace{e^{-rt} \frac{r^K t^K}{K!}}_{\text{probabilité de } K \text{ sauts}} \underbrace{\left[\left(\frac{W}{r} \right)^{1-s} \right]^K}_{\text{Prob}[\text{hist}]^{1-s}} = e^{tr} \left[\left(\frac{r}{W} \right)^s - 1 \right], \quad (1.80)$$

ce qui donne bien l'expression (1.79). Ce résultat peut encore s'obtenir en calculant la fonction Zêta de Ruelle (1.78) :

$$\mathcal{Z}_+(s, z) = \frac{1}{z + r} \sum_{K=0}^{+\infty} \left(\frac{W \left(\frac{r}{W} \right)^{1+s}}{z + r} \right)^K = \frac{1}{z - r \left(\left(\frac{r}{W} \right)^s - 1 \right)} = \frac{1}{z - \psi_+(s)} \quad (1.81)$$

Les fluctuations de Q_+ sont particulièrement simples car $r(\mathcal{C})$ est indépendant de \mathcal{C} , ce qui n'est pas le cas en général dans les systèmes physiques. Un exemple est donné par celui d'une particule qui diffuse sur une chaîne de trois sites avec des conditions au bord réfléchissantes. On peut prendre tous les taux de saut égaux à 1, sauf l'un d'entre eux (saut du site 1 vers le site 2), égal à w . L'opérateur d'évolution et l'opérateur de Perron-Frobenius s'écrivent

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ w & -w-1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{W}_+ = \begin{pmatrix} -1 & (w+1)^s & 0 \\ w^{1-s} & -w-1 & 1 \\ 0 & (w+1)^s & -1 \end{pmatrix} \quad (1.82)$$

La pression topologique, obtenue comme plus grande valeur propre de \mathbb{W}_+ , vaut

$$\psi_+(s) = \frac{1}{2} \left\{ -2 - w + w^{-\frac{s}{2}} \sqrt{w^{s+2} + 4(1+w)^s(w^s + w)} \right\} \quad (1.83)$$

et ne correspond pas à un Q_+ poissonien.

On verra cependant des exemples où $\psi_+(s)$ prend une forme poissonienne similaire à (1.79), dans une limite de grande taille de système (où précisément les $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ deviennent indépendants de \mathcal{C}).

1.5.3 Un système ouvert : la marche aléatoire à conditions absorbantes

Gaspard et Nicolis [61] ont montré qu'il existe un lien générique entre le taux de perte de probabilité γ dans un système ouvert et les coefficients de transport. Nous illustrons dans ce paragraphe sur un exemple qu'un tel lien existe aussi dans notre approche en temps continu. On considère une marche aléatoire sur un réseau euclidien en dimension d , infini dans $d-1$ directions et fini, de taille ℓ , avec bords absorbants dans la direction restante. L'opérateur de Perron-Frobenius \mathbb{W}_+ se décompose sous la forme d'une somme directe de d opérateurs décrivant une marche unidimensionnelle, un pour chaque direction indépendante du système

$$\mathbb{W}_+ = \mathbb{W}_+^{(\ell)} \oplus \mathbb{W}_+^{(\infty)} \oplus \dots \oplus \mathbb{W}_+^{(\infty)} \quad (1.84)$$

avec

$$\mathbb{W}_+^{(\ell)} = \underbrace{\begin{pmatrix} -2D & D(2d)^s & & & (0) \\ D(2d)^s & -2D & D(2d)^s & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & D(2d)^s & -2D & D(2d)^s \\ (0) & & & D(2d)^s & -2D \end{pmatrix}}_{\ell \text{ éléments}} \quad (1.85)$$

$\mathbb{W}_+^{(\infty)}$ étant la version infinie de $\mathbb{W}_+^{(\ell)}$. La pression topologique $\psi_+(s)$ est le maximum du spectre de \mathbb{W}_+ . On trouve

$$\psi_+(s) = 2D \left[(2d)^s \left(\cos \frac{\pi}{\ell+1} - 1 \right) + d((2d)^s - 1) \right] \quad (1.86)$$

Le taux d'échappement γ de la probabilité (cf. notes 1 et 3, section 1.2.1) vaut

$$\gamma = -\psi_+(0) = 2D \left(1 - \cos \frac{\pi}{\ell+1} \right) \quad (1.87)$$

Le développement pour ℓ grand donne

$$\gamma = D \frac{\pi^2}{\ell^2} \quad (1.88)$$

Le résultat (1.88) montre que dans notre approche en temps continu ce lien entre propriétés de transport (D) et taux d'échappement (γ) est bien valide.

1.5.4 Le modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP)

Dans le contexte des systèmes dynamiques, la détermination de l'entropie de Kolmogorov-Sinai est une tâche assez difficile, voire impossible pour des systèmes physiques en interaction, à l'exception du gaz de Lorentz ou de gaz de sphères dures [44, 10, 11]. Dans notre approche, h_{KS} apparaît comme la valeur moyenne (1.49) dans l'état stationnaire de l'observable statique J_+ , ce qui rend sa détermination plus facile. Nous l'illustrons dans ce paragraphe sur le modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP).

Le système est constitué de L sites, vides ($n_i = 0$) ou occupés par une particule ($n_i = 1$). Une particule peut sauter avec un taux D vers son voisin de droite s'il est vide. Autrement dit, le taux de transition entre les configurations $\mathbf{n} = (n_i)$ et $\mathbf{n}' = (\dots, 1 - n_i, 1 - n_{i+1}, \dots)$ vaut $W(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}') = Dn_i(1 - n_{i+1})$. En conditions aux limites périodiques, le nombre de particules $N = \sum_i n_i$ est fixé, l'état stationnaire est uniforme [122] et chaque configuration a la probabilité $P_{\text{st}}(\mathbf{n}) = 1/\binom{L}{N}$. De plus, dans (1.49), $W \ln W$ est égal à $W \ln D$. On voit donc que h_{KS} s'écrit

$$h_{\text{KS}} = \left\langle r(\mathbf{n}) \ln \frac{r(\mathbf{n})}{D} \right\rangle \quad (1.89)$$

où le taux instantané d'échappement de la configuration \mathbf{n} est $r(\mathbf{n}) = D \sum_i n_i(1 - n_{i+1})$. L'état stationnaire étant uniforme, on voit [33] que les fonctions de corrélation spatiale C_k à k points s'expriment simplement sous la forme :

$$C_1 \equiv \langle n_1 \rangle_{\text{st}} = \frac{N}{L} \quad (1.90)$$

$$C_2 \equiv \langle n_1 n_2 \rangle_{\text{st}} = \frac{N(N-1)}{L(L-1)} \quad (1.91)$$

$$C_M \equiv \langle n_1 n_2 \dots n_M \rangle_{\text{st}} = \frac{N(N-1) \dots (N-M+1)}{L(L-1) \dots (L-M+1)} \quad (1.92)$$

À la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ avec $N/L = \rho$ fixé) on obtient $\frac{\langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}}}{L} \rightarrow D\rho(1 - \rho)$. Pour les systèmes finis, la valeur moyenne du taux d'échappement $r(\mathbf{n})$ vaut exactement

$$\langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}} = DL \left(\frac{N}{L} - \frac{N(N-1)}{L(L-1)} \right) \quad (1.93)$$

La valeur instantanée de $r(\mathbf{n})$ se décompose en la somme de sa valeur moyenne, d'ordre L , et d'une partie fluctuante, d'ordre \sqrt{L} :

$$r(\mathbf{n}) = \langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}} (1 + \xi/\sqrt{L}) \quad \text{avec} \quad \xi = \sqrt{L} \frac{r(\mathbf{n}) - \langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}}}{\langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}}} \quad (1.94)$$

Par définition, on a $\langle \xi \rangle_{\text{st}} = 0$. De plus,

$$\langle \xi^2 \rangle_{\text{st}} = L \frac{\langle r(\mathbf{n})^2 \rangle_{\text{st}} - \langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}}^2}{\langle r(\mathbf{n}) \rangle_{\text{st}}^2} \quad (1.95)$$

En distinguant les différentes possibilités d'occupation de sites, on obtient $\langle r(\mathbf{n})^2 \rangle_{st} = 4L \left[C_1 - C_2 + (L-3)(C_2 - 2C_3 + C_4) \right]$, ce qui mène à

$$\langle \xi^2 \rangle_{st} = \frac{L(N-1)(L-N-1)}{N(L-N)(L-2)} \quad (1.96)$$

À l'ordre dominant en L , on obtient $\langle \xi^2 \rangle_{st} = 1 + \mathcal{O}(1/L)$. On peut alors développer $h_{\text{KS}} = \langle r(\mathbf{n}) \ln \frac{r(\mathbf{n})}{D} \rangle_{st}$ comme

$$h_{\text{KS}} = \langle r(\mathbf{n}) \rangle_{st} \ln \langle \frac{r(\mathbf{n})}{D} \rangle_{st} + \frac{1}{2} \langle r(\mathbf{n}) \rangle_{st} \frac{\langle \xi^2 \rangle_{st}}{L} + \mathcal{O}(1/L) \quad (1.97)$$

En notant $\sigma = D\rho(1-\rho)$ et en rassemblant tous les termes, on arrive au résultat

$$h_{\text{KS}} = L\sigma \ln(L\sigma) + \sigma \ln(L\sigma) + \frac{3}{2}\sigma + \frac{\sigma}{L} \ln L + \mathcal{O}(1/L) \quad (1.98)$$

Dans le cas du modèle d'exclusion symétrique (SEP), où une particule peut sauter vers la droite ou la gauche (si le site d'arrivée est vide), on obtient le même résultat avec $\sigma = 2D\rho(1-\rho)$. Dans le SEP, on constate ainsi que l'entropie KS est, à la limite thermodynamique, une fonction simple de la compressibilité σ du système.

Dans ces deux systèmes, la pression topologique $\psi_+(s)$ semble difficile à obtenir directement. En revanche, on peut s'intéresser à la thermodynamique des histoires associée à un paramètre plus simple, comme K , le nombre d'événements dans une histoire. Pour le TASEP, cette quantité correspond au courant total de particules dans le système entre les instants 0 et t . La fonction de grandes déviations $\psi_K(s)$ correspondante a été déterminée exactement dans [34, 35]. Pour le SEP, l'étude de cette fonction fait l'objet du chapitre 7.

1.5.5 Courant d'entropie

Outre K et Q_+ , une importante observable extensive en temps pour les processus de Markov en temps continu est donnée par le courant d'entropie Q_S [93], défini par

$$Q_S = \sum_{k=0}^{K-1} \ln \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{W(\mathcal{C}_{k+1} \rightarrow \mathcal{C}_k)} \quad (1.99)$$

C'est l'observable dont la fonction génératrice des cumulants $\psi_S(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \langle e^{-sQ_S} \rangle$ vérifie la symétrie $\psi_S(s) = \psi_S(1-s)$, qui constitue une des formulations possibles du théorème de fluctuation [50, 52, 58, 64, 90, 93, 96] (cf. également paragraphe 5.2.3). Pour les systèmes physiques, Q_S s'écrit en général sous la forme d'une combinaison linéaire des divers courants (de charge, de particule, d'énergie) traversant le système, pondérés par leur force (ou leur affinité) conjuguée (voir partie 5.2 également). On remarque que Q_S est nul pour une dynamique d'équilibre, *i.e.* dont les taux de transition vérifient le bilan détaillé

$$P_{\text{eq}}(\mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) = P_{\text{eq}}(\mathcal{C})W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') . \quad (1.100)$$

De manière plus générale, l'interprétation de Q_S comme un courant d'entropie intégré provient du fait [93, 63, 96] que l'entropie – de Boltzmann-Gibbs – dépendante du temps

$$S(t) = - \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}, t) \ln P(\mathcal{C}, t) \quad (1.101)$$

évolue selon

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_{\text{irr}} + \sigma_{\text{f}} \quad (1.102)$$

où σ_{irr} est défini par

$$\sigma_{\text{irr}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} [W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')P(\mathcal{C}, t) - W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', t)] \ln \frac{P(\mathcal{C}, t)W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{P(\mathcal{C}', t)W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})} \quad (1.103)$$

et vérifie $\sigma_{\text{irr}} \geq 0$, avec égalité seulement si le bilan détaillé (1.100) est vérifié. Le second terme σ_{f} représente le flux d'entropie, associé aux forces extérieures qui pilotent le système dans un état stationnaire hors d'équilibre, pour lequel $\sigma_{\text{f}} = -\sigma_{\text{irr}} \leq 0$ et

$$\sigma_{\text{f}} = -\langle J_S(\mathcal{C}) \rangle_{st} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_S \rangle}{t}, \quad (1.104)$$

avec $J_S(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln \frac{W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})}$.

1.5.6 Entropie de Kolmogorov-Sinai renversée dans le temps

On peut légitimement se demander s'il existe un lien entre l'entropie dynamique h_{KS} (qui mesure la complexité des histoires) et l'entropie de Boltzmann-Gibbs $S(t)$ (définie en (1.101), qui mesure la complexité des configurations). En suivant l'approche en temps discret de Gaspard [65], on peut réaliser un tel lien en définissant une nouvelle observable Q_- qui décrit les trajectoires renversées dans le temps

$$Q_-(t) = \sum_{k=0}^{K-1} \ln \frac{W(\mathcal{C}_{k+1} \rightarrow \mathcal{C}_k)}{r(\mathcal{C}_k)} \quad (1.105)$$

Lui est associée l'entropie dynamique $\psi_-(s)$ ainsi que l'entropie de Kolmogorov-Sinai renversée dans le temps [65] h_{KS}^R :

$$h_{\text{KS}}^R = \left. \frac{d\psi_-}{ds} \right|_{s=0} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_- \rangle}{t} = -\langle J_-(\mathcal{C}) \rangle_{st} \quad (1.106)$$

avec $J_-(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln \frac{W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})}{r(\mathcal{C})}$. D'après les définitions, on voit que

$$(i) \quad Q_S = Q_+ - Q_-, \quad (ii) \quad J_S = J_+ - J_- \quad (1.107)$$

et, dans l'état stationnaire,

$$(iii) \quad \sigma_{\text{f}} = h_{\text{KS}} - h_{\text{KS}}^R \quad (1.108)$$

L'égalité (iii) possède un analogue dans le cadre des systèmes dynamiques : h_{KS} (resp. $-h_{\text{KS}}^R$) représente la somme des exposants de Lyapounov positifs (resp. négatifs) et σ_{f} correspond au taux de contraction dans l'espace de phase (somme de tous les exposants de Lyapounov). Remarquons enfin que les égalités (i) et (ii) dans (1.107) sont des égalités entre quantités fluctuantes.

1.5.7 Variation d'entropie de Kolmogorov-Sinai

L'entropie de Kolmogorov-Sinai, par construction, donne une mesure du “désordre dynamique” d'un système lorsqu'on suit son évolution dans l'espace de phase sur une longue durée. Pour un système qui part d'un état initial P qui n'est pas l'état stationnaire de l'équation maîtresse, on s'attend à ce que le “désordre dynamique” évolue dans le temps [5]. Pour étudier cette variation, l'expression (1.49) de h_{KS} suggère fortement de définir l'entropie dynamique $h_{\text{KS}}[P]$ *dépendante de l'état P* comme

$$h_{\text{KS}}[P] = - \left\langle \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln \frac{W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{r(\mathcal{C})} \right\rangle_P \quad (1.109)$$

$$= - \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} P(\mathcal{C}) W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \ln \frac{W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')}{r(\mathcal{C})} \quad (1.110)$$

Cette quantité s'interprète comme la propension instantanée du système à explorer l'espace de phase partant de l'état P (elle jouerait le rôle de la somme des exposants de Lyapounov positifs instantanés dans le cadre des systèmes dynamiques). Le calcul de $h_{\text{KS}}[P]$ pour un système de spins d'Ising en interaction à portée infinie est détaillé au paragraphe 2.2.5.

Chapitre 2

Approche en champ moyen

Nous appliquons la méthode exposée au chapitre précédent à des systèmes décrits en champ moyen. Cette simplification permet de développer l’analogue dynamique du paysage d’énergie libre de Landau. Les résultats ont été obtenus en collaboration avec Cécile Appert-Rolland, Frédéric van Wijland, Robert Jack et Juan P. Garrahan, et correspondent en partie aux publications **P2**, **P3** et **P6**.

2.1 Cas général

2.1.1 Dynamique

Nous étudions dans ce chapitre quelques modèles où l’approche en champ moyen donne des résultats exacts, à l’instar de ce qui se passe pour la thermodynamique d’équilibre. L’image que l’on va obtenir permet d’illustrer de nombreux aspects de la thermodynamique des histoires, et en particulier de donner des exemples d’états- s , ou de résultats explicites pour l’énergie libre dynamique $\psi_A(s)$.

Les modèles que nous allons étudier sont constitués de N spins $1/2$ $\{\sigma_i\}$ ($\sigma_i = -1$ ou $+1$), ou bien de N sites $\{n_i\}$ vides ou occupés ($n_i = 0$ ou 1). Les interactions entre les constituants du système seront supposées de portée infinie, rendant possible une approche en champ moyen. Avant d’étudier de manière générale ce type de système, il est utile de définir leur dynamique sur quelques exemples analysés en détail dans la suite.

(i) Système de spins d’Ising sur un graphe complet :

Le hamiltonien du système s’écrit

$$H(\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_i\}) = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j = -\frac{M^2}{2N} \quad (2.1)$$

où

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (2.2)$$

est l’aimantation totale du système. La forme du hamiltonien traduit l’interaction de tous les spins entre eux. L’état stationnaire (d’équilibre) $P_{\text{eq}}(\boldsymbol{\sigma})$ d’une configuration de

spins $\sigma = \{\sigma_i\}$ à la température inverse β est donné par le facteur de Boltzmann-Gibbs $P(\sigma) \propto \exp[-\beta H(\sigma)]$. Le système est muni d'une dynamique de type Glauber en temps continu, pour laquelle chaque spin σ_i se retourne avec un taux

$$W(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i) = e^{-\beta \sigma_i \frac{M}{N}} \quad (2.3)$$

Ces taux vérifient le bilan détaillé par rapport à la loi $P(\sigma)$. Cette dynamique est celle utilisée par Ruijgrok et Tjon [113] dans leur étude de la dynamique de ce système de spins d'Ising. Nous étudierons sa thermodynamique des histoires dans la partie 2.2

(ii) Processus de contact sur graphe complet :

La dynamique du système, constitué de N sites n_i vides ou occupés par une particule, est la suivante. Chaque particule s'annihile avec un taux 1, tandis que chaque site vide se remplit soit spontanément (avec un taux h), soit avec un taux proportionnel au nombre de ses voisins. Sur le graphe complet, les taux de transition correspondants s'écrivent

$$\begin{cases} W(n_i = 1 \rightarrow n_i = 0) = 1 \\ W(n_i = 0 \rightarrow n_i = 1) = h + \lambda n/N \end{cases} \quad (2.4)$$

où $n = \sum_i n_i$ est le nombre total de sites occupés. Nous motiverons l'étude de ce système et effectuerons sa thermodynamique des histoires dans la partie 2.4.

Dans ce type de système, les taux de transition se mettent génériquement sous une forme qui ne dépend que de la valeur du spin retourné et de l'aimantation totale M du système avant retournement

$$\begin{cases} W(\sigma_i = +1 \rightarrow \sigma_i = -1) = w^-(M) \\ W(\sigma_i = -1 \rightarrow \sigma_i = +1) = w^+(M) \end{cases} \quad (2.5)$$

pour les systèmes de spins ; ou sous une forme qui ne dépend que du nombre total n de sites occupés avant annihilation/création

$$\begin{cases} W(n_i = 1 \rightarrow n_i = 0) = w^-(n) \\ W(n_i = 0 \rightarrow n_i = 1) = w^+(n) \end{cases} \quad (2.6)$$

pour les systèmes de particules. Ces deux points de vue sont équivalents, *modulo* les correspondances

$$n_i \leftrightarrow \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad n \leftrightarrow \frac{N + M}{2} \quad N - n \leftrightarrow \frac{N - M}{2} \quad (2.7)$$

et, sauf indication contraire, nous prendrons celui des systèmes de spins dans la suite de ce chapitre.

Notons que, pour simplifier, nous nous sommes restreints, aux systèmes dont les spins possèdent deux états différents. La généralisation à de plus grands nombres d'états se fait sans problème (voir le modèle de Potts, section 2.3.2, pour un exemple).

2.1.2 Espace des spins, espace des aimantations

Dans l'espace des spins individuels, l'équation maîtresse s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t P(\boldsymbol{\sigma}, t) = \sum_i \left\{ w^+(M-2) \frac{1+\sigma_i}{2} P(\sigma_1, \dots, -1, \dots, \sigma_N, t) \right. \\ \left. + w^-(M+2) \frac{1-\sigma_i}{2} P(\sigma_1, \dots, 1, \dots, \sigma_N, t) \right\} - r(\boldsymbol{\sigma}) P(\boldsymbol{\sigma}, t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

où $M = \sum_i \sigma_i$ désigne l'aimantation de la configuration $\boldsymbol{\sigma}$, et le taux d'échappement $r(\boldsymbol{\sigma})$ vaut

$$r(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{N-M}{2} w^+(M) + \frac{N+M}{2} w^-(M) \quad (2.9)$$

On remarque cependant que l'évolution des configurations s'effectue par saut $M \rightarrow M \pm 2$ dans l'espace des aimantations M , et que les taux des transitions autorisées (2.5) ne dépendent *que* de la valeur de M . En partant d'un état initial $P(\boldsymbol{\sigma}, 0)$ uniforme dans chaque sous-espace d'aimantation fixée, la probabilité $P(\boldsymbol{\sigma}, t)$ conserve cette propriété à tout temps, et on peut avantageusement traduire l'équation maîtresse (2.8) dans l'espace des aimantations M sous la forme

$$\partial_t P(M, t) = W^+(M-2) P(M-2, t) + W^-(M+2) P(M+2, t) - r(M) P(M, t) \quad (2.10)$$

avec des taux de transition égaux à

$$\begin{cases} W^-(M) \equiv W(M \rightarrow M-2) = \frac{N+M}{2} w^-(M) \\ W^+(M) \equiv W(M \rightarrow M+2) = \frac{N-M}{2} w^+(M) \end{cases} \quad (2.11)$$

Ils correspondent respectivement aux taux de diminution et d'augmentation de l'aimantation du système. Les facteurs $\frac{N \pm M}{2}$ comptent le nombre de spins susceptibles de se retourner vers le bas ou vers le haut. Le taux d'échappement $r(M)$ s'écrit toujours comme dans (2.9) sous la forme

$$r(M) = \frac{N-M}{2} w^+(M) + \frac{N+M}{2} w^-(M) = W^+(M) + W^-(M) \quad (2.12)$$

Pour les systèmes de particules, les taux correspondent à une annihilation ou une création, et, dans l'espace du nombre total de particules, prennent la forme

$$\begin{cases} W^-(n) \equiv W(n \rightarrow n-1) = n w^-(M) \\ W^+(n) \equiv W(n \rightarrow n+1) = (N-n) w^+(M) \end{cases} \quad (2.13)$$

On se référera au paragraphe 2.1.5 et à l'annexe C pour une représentation des deux équations maîtresses (2.8) et (2.10) en fonction d'opérateurs de spin, et pour le passage de l'une à l'autre.

Dans l'espace des aimantations, la dynamique est essentiellement unidimensionnelle (l'aimantation varie de $-N$ à N par pas de 2). On s'attend donc à ce que soit une dynamique

d'équilibre. Nous allons montrer que c'est bien le cas en général. On suppose désormais que l'inverse de toute transition autorisée est encore une transition autorisée ($W^\pm(M) > 0 \Rightarrow W^\mp(M \pm 2) > 0$). Sans perte de généralité (quitte à diminuer la valeur de N), si la dynamique est irréductible, cela revient à supposer que $W^+(M) > 0$ pour $-N \leq M < N$ et $W^-(M) > 0$ pour $-N < M \leq N$, ce qui est le cas en l'absence d'état absorbant. Dans cette situation, la dynamique markovienne possède un état d'équilibre, qui s'écrit dans l'espace des aimantations comme¹

$$P_{\text{eq}}(M) \propto \prod_{\mu=-N}^M [W^-(\mu)]^{-1} \prod_{\mu=-N}^{M-2} W^+(\mu) \quad (2.14)$$

Cette distribution vérifie le bilan détaillé

$$P_{\text{eq}}(M)W^+(M) = P_{\text{eq}}(M+1)W^-(M+2) \quad (2.15)$$

2.1.3 Énergie libre dynamique à l'ordre dominant

On souhaite étudier la thermodynamique des histoires associée à une quantité A , extensive en temps, qui évolue à chaque augmentation ou diminution de l'aimantation selon

$$\begin{cases} M \rightarrow M \pm 2 \\ A \rightarrow A + \alpha_\pm(M) \end{cases} \quad (2.16)$$

De l'équation maîtresse sur $P(M, A, t)$ on obtient comme au paragraphe 1.4.3 une équation d'évolution pour la transformée de Laplace $\hat{P}_A(M, s, t) = \sum_A e^{-sA} P(M, A, t)$ de la forme $\partial_t \hat{P}_A = \mathbb{W}_A \hat{P}_A$. Les éléments de l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_A s'écrivent

$$\begin{aligned} (\mathbb{W}_A)_{M, M'} &= W^+(M-2) e^{-s\alpha_+(M-2)} \delta_{M', M-2} \\ &\quad + W^-(M+2) e^{-s\alpha_-(M+2)} \delta_{M', M+2} - r(M) \delta_{M', M} \end{aligned} \quad (2.17)$$

L'énergie libre dynamique $\psi_A(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_M \hat{P}_A(M, s, t)$ est la plus grande valeur propre de \mathbb{W}_A . On sait que l'opérateur $\mathbb{W} = \mathbb{W}_A|_{s=0}$ de la dynamique markovienne originale est symétrisable grâce à la distribution d'équilibre (2.14). Pour s non nul, il existe une opération de symétrisation analogue : en définissant l'opérateur diagonal²

$$(Q_A)_{M, M'} = \delta_{M, M'} [P_{\text{eq}}(M)]^{1/2} \prod_{\mu=-N}^M e^{\frac{s}{2}\alpha_-(\mu)} \prod_{\mu=-N}^{M-2} e^{-\frac{s}{2}\alpha_+(\mu)}, \quad (2.18)$$

l'opérateur *symétrisé*

$$\tilde{\mathbb{W}}_A = Q_A^{-1} \mathbb{W}_A Q_A \quad (2.19)$$

est hermitien et a le même spectre que \mathbb{W}_A . Ses éléments s'écrivent

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbb{W}}_A)_{M, M'} &= [W_A^-(M) W_A^+(M-2)]^{1/2} \delta_{M', M-2} \\ &\quad + [W_A^+(M) W_A^-(M+2)]^{1/2} \delta_{M', M+2} - r(M) \delta_{M', M} \end{aligned} \quad (2.20)$$

¹Dans l'écriture (2.14) de l'état d'équilibre, la valeur de μ varie de 2 en 2 dans chaque produit.

²Les valeurs de μ courent toujours de 2 en 2.

avec les taux de transition modifiés

$$W_A^\pm(M) = W^\pm(M) e^{-s \alpha_\pm(M)} \quad (2.21)$$

Pour $s=0$, on retrouve l'opération de symétrisation habituelle. Dans l'expression (2.20), le terme diagonal reste bien sûr inchangé, égal à $r(M) = W^+(M) + W^-(M)$, avec les taux non modifiés. L'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$, valeur propre maximale de $\tilde{\mathbb{W}}_A$, s'obtient grâce à une identité variationnelle, valable pour tout opérateur symétrique :

$$\psi_A(s) = \max_P \text{Sp } \mathbb{W}_A = \max_P \frac{\langle P | \tilde{\mathbb{W}}_A | P \rangle}{\langle P | P \rangle} \quad (2.22)$$

On s'intéresse à l'ordre dominant en N de $\psi_A(s)$ à la limite thermodynamique (N grand). On suppose que les taux de transition $W^+(M)$ et $W^-(M)$ sont du même ordre en la taille du système (N , dans les exemples présenté ci-dessus), tout comme les courants élémentaires $\alpha_\pm(M)$, que l'on prend d'ordre 1. Notons, d'après (2.14), qu'à l'équilibre, l'état P_{eq} ne dépend que de l'aimantation $M = mN$. On cherche ici un état P sous la forme $P(M) \sim e^{Nf(m)}$ avec $m = M/N$, ce qui donne

$$\psi_A(s) = \max_f \frac{\sum_M \left[(W_A^+ W_A^-)^{1/2} (e^{2\partial_m f} + e^{-2\partial_m f}) - W^+ - W^- \right] e^{2Nf(m)}}{\sum_M e^{2Nf(m)}} \quad (2.23)$$

où, à l'ordre dominant, W_A^+ , W_A^- , W^+ et W^- dépendent de l'aimantation seulement par l'intermédiaire de m . Pour chaque fonction f , la somme (2.23) est dominée par les $M = mN$ tels que $f(m)$ est maximal (ce qui implique $\partial_m f = 0$). La dépendance directe en f disparaît et il n'y a plus qu'à maximiser sur la valeur moyenne m de l'aimantation :

$$\psi_A(s) = \max_{-1 \leq m \leq 1} \left\{ 2(W_A^+ W_A^-)^{1/2} - W^+ - W^- \right\} + \mathcal{O}(1) \quad (2.24)$$

En particulier, $\psi_A(s)$ est d'ordre N . Les corrections de taille finie (notées $\mathcal{O}(1)$) seront étudiées au paragraphe (2.1.7). L'équation (2.24) est le résultat central de ce chapitre : elle permet de déterminer $\psi_A(s)$ en utilisant une image d'énergie libre à la Landau. En définissant la quantité

$$\mathcal{F}_A(m, s) = \frac{1}{N} \left\{ -2(W_A^+ W_A^-)^{1/2} + W^+ + W^- \right\} \quad (2.25)$$

qui ne dépend pas de N pour N grand, l'ordre dominant de $\psi_A(s)$ s'obtient en effet suivant le "principe variationnel" :

$$\frac{1}{N} \psi_A(s) = - \min_{-1 \leq m \leq 1} \mathcal{F}_A(m, s) \quad (2.26)$$

Cette procédure de minimalisation permet d'interpréter $\mathcal{F}_A(m, s)$ à la manière d'une énergie libre *dynamique* à la Landau. On verra notamment que certaines caractéristiques de systèmes vitreux sont associés à la présence de plusieurs minima de $\mathcal{F}_A(m, s)$ (cf. chapitre 3).

2.1.4 Interprétation de l'énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}_A(m, s)$

Pour comprendre plus précisément la signification du paysage d'énergie libre $\mathcal{F}_A(\rho, s)$, et du minima atteint dans le principe variationnel $\frac{1}{N}\psi_A(s) = -\min_{-1 \leq m \leq 1} \mathcal{F}_A(m, s)$, considérons la moyenne habituelle de e^{-sK} , mais restreinte aux histoires qui ont une valeur fixée m de l'aimantation intégrée au cours du temps :

$$\left. \begin{array}{l} \text{probabilité (non-normalisée), dans l'ensemble-}s, \text{ de mesurer} \\ \text{une aimantation } \textit{moyennée dans le temps} \text{ égale à } m \text{ entre } 0 \text{ et } t \end{array} \right| = \left\langle e^{-sK} \delta\left(m - \frac{1}{Lt} \int_0^t d\tau M(\tau)\right) \right\rangle \equiv e^{-Lt\mathcal{F}_A^*(m,s)} \quad (2.27)$$

Cette moyenne se comporte exponentiellement en temps, avec un taux $-L\mathcal{F}_A^*(m, s)$. Nous allons montrer qu'en fait $\mathcal{F}_A^*(m, s) = \mathcal{F}_A(m, s)$. Considérons tout d'abord la transformée de Laplace $\int dh e^{-hm} \langle e^{-sK} \delta(m - \frac{1}{Lt} \int_0^t d\tau M(\tau)) \rangle$ de (2.27) par rapport à m . Elle s'écrit

$$\left\langle \exp\left(-sK - h \int_0^t M(\tau) d\tau\right) \right\rangle = \int dm e^{-Lt(\mathcal{F}_A^*(m,s) + hm)} \sim e^{-Lt \min_m (\mathcal{F}_A^*(m,s) + hm)} \quad (2.28)$$

De plus, le comportement exponentiel en temps du membre de gauche de cette dernière équation est donné par la plus grande valeur propre de l'opérateur d'éléments (*cf.* par exemple (1.60)) $W_A^+(M-2) \delta_{M', M-2} + W_A^-(M+2) \delta_{M', M+1} - [W^+(M) + W^-(M) + hM] \delta_{n', n}$. On peut à nouveau symétriser cet opérateur (le nouveau terme $hn\delta_{n', n}$ n'est pas modifié) et utiliser la procédure variationnelle du paragraphe précédent. On obtient que la valeur propre maximale est donnée par $-L \min_m (\mathcal{F}_A^*(m, s) + hm)$. Enfin, d'après (2.28), on obtient

$$\min_m (\mathcal{F}_A(m, s) + hm) = \min_m (\mathcal{F}_A^*(m, s) + hm) \quad (2.29)$$

et on peut identifier \mathcal{F} et \mathcal{F}^* (pourvu que la transformée de Legendre inverse puisse être prise – pour autre une approche sans ce problème, on peut utiliser la théorie de Donsker-Varadhan [43], *cf.* annexe E).

En intégrant (2.27) par rapport à m , on obtient à nouveau $\frac{1}{L}\psi_A(s) = -\min_{0 \leq m \leq 1} \mathcal{F}_A(m, s)$. Maintenant, la signification du minimum est claire : il représente l'aimantation moyenne intégrée au cours du temps, dans l'état- s , et non la densité au temps final. Ceci ce voit par exemple en dérivant (2.28) par rapport à h et en prenant la limite $h \rightarrow 0$. Explicitement le minimum du paysage d'énergie libre dynamique de Landau est atteint pour $m_K(s)$

$$m_K(s) = \frac{1}{t} \frac{\left\langle \int_0^t d\tau M(\tau) e^{-sA} \right\rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (2.30)$$

Nous verrons par la suite deux autres méthodes pour arriver à (2.24).

Les deux observables de type A qui vont nous servir le plus sont la complexité dynamique Q_+ et le nombre d'événements K . Les énergies libres à la Landau $\mathcal{F}_A(m, s)$ correspondantes donnent :

★ pour $A = K$, $\alpha_{\pm}(M) = 1$, et

$$\psi_K(s) = - \min_{m \in [-1,1]} \left\{ -2e^{-s} [W^+ W^-]^{\frac{1}{2}} + W^+ + W^- \right\} + \mathcal{O}(1) \quad (2.31)$$

★ pour $A = Q_+$, $\alpha_{\pm}(M) = \ln \frac{W^{\pm}(M)}{W^+(M)+W^-(M)}$ et

$$\psi_+(s) = - \min_{m \in [-1,1]} \left\{ -2 [W^+ W^-]^{\frac{1-s}{2}} [W^+ + W^-]^s + W^+ + W^- \right\} + \mathcal{O}(1) \quad (2.32)$$

Le lecteur impatient peut directement passer à la section 2.2 pour une illustration physique de ces résultats, les paragraphes intermédiaires détaillant d'autres approches pour obtenir (2.24) avec les corrections de taille finie.

2.1.5 Formalisme d'opérateur

L'équation maîtresse (2.8) pour la probabilité $P(\boldsymbol{\sigma}, t)$ dans l'espace des spins individuels peut être traduite en terme d'opérateurs de spins 1/2. On définit une base $|\boldsymbol{\sigma}\rangle$ orthonormée associée aux configurations $\boldsymbol{\sigma}$. L'évolution temporelle du vecteur

$$|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} P(\boldsymbol{\sigma}, t) |\boldsymbol{\sigma}\rangle \quad (2.33)$$

s'écrit, d'après (2.8), grâce aux opérateurs (de spin 1/2) de Pauli $\sigma_i^{x,y,z}$, sous la forme

$$\partial_t |\Psi\rangle = \sum_{i, \boldsymbol{\sigma}} \left\{ \sigma_i^x \frac{1 - \sigma_i^z}{2} w^+(\boldsymbol{\sigma}) + \sigma_i^x \frac{1 + \sigma_i^z}{2} w^-(\boldsymbol{\sigma}) \right\} P(\boldsymbol{\sigma}) |\boldsymbol{\sigma}\rangle - r(M^z) |\Psi\rangle \quad (2.34)$$

On en déduit la forme de l'opérateur d'évolution \mathbb{W} (tel que $\partial_t |\Psi\rangle = \mathbb{W} |\Psi\rangle$) :

$$\mathbb{W} = M^- w^-(M^z) + M^+ w^+(M^z) - r(M^z) \quad (2.35)$$

où l'on a défini

$$M^{\pm} = \frac{M^x \pm iM^y}{2} \quad \text{avec} \quad M^{x,y,z} = \sum_i \sigma_i^{x,y,z} \quad (2.36)$$

Il est également possible de retrouver l'expression (2.35) de l'opérateur d'évolution en partant de l'équation maîtresse (2.10) dans l'espace des aimantations, à condition de choisir une base adéquate pour les états d'aimantation fixée (annexe C). De la même manière, on trouve que l'opérateur d'évolution associé à A s'écrit

$$\mathbb{W}_A = M^- e^{-s\alpha_-(M^z)} w^-(M^z) + M^+ e^{-s\alpha_+(M^z)} w^+(M^z) - r(M^z) \quad (2.37)$$

Nous allons voir dans les sections suivantes que l'étude de cet opérateur de spin permet de retrouver le principe d'extrémalisation (2.25-2.26) sans avoir à effectuer de symétrisation (paragraphe 2.1.6) ou en accédant aux corrections de taille finie (paragraphe 2.1.7).

2.1.6 États cohérents de spin

Comme nous le montrons dans l'annexe D, on peut utiliser les états cohérents de spin [88, 106] pour déterminer le comportement aux grands temps de $\langle e^{t\mathbb{W}_A} \rangle$ dans la limite des grands spins ($N \rightarrow \infty$) sous la forme d'une intégrale de chemin sur deux champs m et ϕ :

$$\langle e^{t\mathbb{W}_A} \rangle \sim \int \mathcal{D}m \mathcal{D}\phi \exp \int_0^t \{ N\phi \partial_t m + \mathcal{W}_A(m, \phi) \} \quad (2.38)$$

où la fonction $\mathcal{W}_A(m, \phi)$ s'obtient à partir de \mathbb{W}_A en y substituant les opérateurs M^z , M^+ et M^- par les fonctions suivantes :

$$\begin{cases} M^z \rightarrow Nm \\ M^\pm \rightarrow \frac{1}{2}N\sqrt{1-m^2}e^{\pm\phi} \end{cases} \quad (2.39)$$

Les opérateurs M^z et M^\pm ne commutent pas, ce qui rend l'opération (2.39) ambiguë. On vérifie cependant que l'ordre des opérateurs M^z et M^\pm dans (2.37) n'a pas d'importance pour déterminer $\psi_A(s)$ à l'ordre dominant en N [124]. À cet ordre là, les valeurs de $w^\pm(M^z)$ et $\alpha_\pm(M^z)$ ne dépendent plus que de m . On cherche les chemins stationnaires qui extrémalisent l'intégrale dans (2.38), par un argument de point col. Les équations correspondantes sont $\partial\mathcal{W}_A/\partial\phi = 0$ et $\partial\mathcal{W}_A/\partial m = 0$. La première d'entre elles :

$$-e^{-\phi}w^-(m)e^{-s\alpha_-(m)} + e^{\phi}w^+(m)e^{-s\alpha_+(m)} = 0 \quad (2.40)$$

permet d'obtenir la valeur ϕ au point col

$$e^{\phi} = \left[\frac{w^-(m)}{w^+(m)} \right]^{1/2} e^{s[-\alpha_-(m) + \alpha_+(m)]/2} \quad (2.41)$$

ce qui élimine le champ ϕ de l'extrémalisation. En rassemblant les résultats précédents, on obtient :

$$\langle e^{t\mathbb{W}_A} \rangle \sim \int \mathcal{D}m \exp \int_0^t \left\{ \sqrt{1-m^2} \left[w^+ w^- e^{-s(\alpha_+ + \alpha_-)} \right]^{1/2} - \frac{1+m}{2} w^+ - \frac{1-m}{2} w^- \right\} \quad (2.42)$$

En revenant aux taux de transition (2.11) dans l'espace des aimantations ($W^\pm = N \frac{1 \mp m}{2} w^\pm$) on obtient à nouveau exactement le "principe variationnel" (2.25-2.26).

Cette méthode des états cohérents de spin ne nécessite pas la symétrisation préalable de l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_A (c'est l'élimination du champ ϕ qui a joué ce rôle). En revanche, elle ne permet pas directement d'accéder aux corrections de taille finie, en raison des problèmes de commutation des opérateurs (il faudrait effectuer un calcul précis de la valeur des produits de la forme $M^+ M^z$ entre deux états cohérents de spin [124]). Pour y accéder, nous utiliserons plutôt la représentation de Holstein-Primakoff des opérateurs de spins, très proche des états cohérents, mais dont les relations de commutation sont plus aisément utilisables (paragraphe 2.1.7).

Insistons sur le fait que dans cette approche il n'est pas nécessaire de symétriser l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_A . Ceci est utile, par exemple, dans un cas un peu plus général où le système est décrit à l'échelle macroscopique par deux aimantations totales (au lieu d'une) : l'état stationnaire ne vérifie alors pas nécessairement le bilan détaillé (2.14-2.15). Dans une telle situation, le système atteint un état stationnaire hors d'équilibre et il n'est pas possible de symétriser \mathbb{W}_A . La méthode des états cohérents, exposée dans ce paragraphe, permet toutefois d'obtenir des résultats (*cf.* paragraphe 6.3.2 pour un exemple).

2.1.7 Corrections de taille finie

La première étape consiste à nouveau à symétriser l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_A écrit en fonction des opérateurs de spin (éq. (2.37)). Grâce aux relations

$$M^z M^- = M^-(M^z - 2) \quad M^z M^+ = M^+(M^z + 2) \quad (2.43)$$

et à l'expression explicite de la distribution d'équilibre (2.14), on voit que l'opérateur diagonal

$$Q_A = \left[\left(\binom{N}{\frac{N+M}{2}} \right)^{-1} P_{\text{eq}(M)} \right]^{1/2} \prod_{m=-N}^M e^{\frac{s}{2}\alpha_-(m)} \prod_{m=-N}^{M-2} e^{-\frac{s}{2}\alpha_+(m)} \quad (2.44)$$

permet de symétriser \mathbb{W}_A suivant

$$\tilde{\mathbb{W}}_A \equiv Q_A^{-1} \mathbb{W}_A Q_A \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} &= M^- \left[w^-(M^z) w^+(M^z - 2) \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{s}{2} [\alpha_-(M^z) + \alpha_+(M^z - 2)]} \\ &\quad + M^+ \left[w^+(M^z) w^-(M^z + 2) \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{s}{2} [\alpha_+(M^z) + \alpha_-(M^z + 2)]} - r(M^z) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Pour étudier le spectre de $\tilde{\mathbb{W}}_A$ et en particulier sa valeur propre maximale $\psi_A(s)$ dans la limite $N \rightarrow \infty$, une possibilité – en suivant Ruijgrok et Tjon [113] – est d'utiliser la représentation (exacte) des opérateurs de spins (L^x, L^y, L^z) donnée par Holstein et Primakoff [74]

$$L^x = N - 2a^\dagger a \quad (2.47)$$

$$iL^y = a^\dagger \left(N - a^\dagger a \right)^{\frac{1}{2}} - \left(N - a^\dagger a \right)^{\frac{1}{2}} a \quad (2.48)$$

$$L^z = a^\dagger \left(N - a^\dagger a \right)^{\frac{1}{2}} + \left(N - a^\dagger a \right)^{\frac{1}{2}} a \quad (2.49)$$

en termes d'opérateurs bosoniques a et a^\dagger de création et d'annihilation. Une telle représentation n'est pas unique, car toute rotation du vecteur (L^x, L^y, L^z) reste une représentation valide de l'algèbre de spins. Il sera en fait nécessaire, pour étudier le développement de \mathbb{W}_A en puissances de N , d'utiliser cette liberté en écrivant les opérateurs (M^x, M^y, M^z) de (2.37) comme une rotation de (L^x, L^y, L^z) autour de la direction y . Plus précisément, toujours suiv-

ant [113], on pose $M^y = L^y$ et³

$$\begin{pmatrix} M^x \\ M^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & -m \\ m & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L^x \\ L^z \end{pmatrix}, \quad p = \sqrt{1 - m^2} \quad \text{et} \quad -1 \leq m \leq 1 \quad (2.50)$$

Le choix du paramètre m permettra de déterminer la valeur $\psi_A(s)$ du fondamental de \mathbb{W}_A . Dans l'approche originale de Ruijgrok et Tjon [113], la représentation (2.50) permet d'étudier la dynamique d'un modèle de spins (précisément le modèle (i) défini au paragraphe 2.1.1) et la valeur de m correspond à la valeur de l'aimantation moyenne $\langle M \rangle / N$ du système dans l'état stationnaire. Dans notre approche, nous verrons que le choix de m qui permet de déterminer le fondamental de $\tilde{\mathbb{W}}_A$ correspond à nouveau à la valeur moyenne de l'aimantation $m_A(s) = \langle M \rangle_s / N$ dans l'état- s (cf. également (2.26) et (2.30)). Une fois insérée la représentation (2.47-2.50) dans l'expression symétrisée (2.46) de l'opérateur d'évolution, on peut effectuer un développement en puissances de N :

$$\tilde{\mathbb{W}}_A = H^{(2)} N + (a + a^\dagger) H^{(1)} \sqrt{N} + \hat{H}^{(0)} + \mathcal{O}(N^{-1/2}) \quad (2.51)$$

Les quantités $H^{(2)}$ et $H^{(1)}$ sont des fonctions qui dépendent de m , et $\hat{H}^{(0)}$ est un opérateur quadratique en a et a^\dagger . Pour obtenir l'ordre dominant de $\psi_A(s)$, seuls $H^{(2)}$ et $H^{(1)}$ comptent. On obtient

$$H^{(2)} = [(1 - m^2)w_A^+ w_A^-]^{\frac{1}{2}} - \frac{1 - m}{2} w^+ - \frac{1 + m}{2} w^- \quad (2.52)$$

$$H^{(1)} = \frac{(1 - m^2)\partial_m(w_A^+ w_A^-) - 2mw_A^+ w_A^-}{2[w_A^+ w_A^-]^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}\sqrt{1 - m^2}\{w^- + (1 + m)\partial_m w^- - w^+ + (1 - m)\partial_m w^+\} \quad (2.53)$$

où les fonctions w^\pm et w_A^\pm ne dépendent que de m :

$$w^\pm = \lim_{N \rightarrow \infty} w^\pm(M = mN) \quad (2.54)$$

$$w_A^\pm = \lim_{N \rightarrow \infty} w_A^\pm(M = mN) \quad (2.55)$$

et les taux $w_A^\pm(M)$ décrivent la dynamique modifiée par s :

$$w_A^\pm(M) = w^\pm(M) e^{-s\alpha_\pm(M)} \quad (2.56)$$

Si l'opérateur originel $\tilde{\mathbb{W}}_A$ s'exprime simplement (2.37) en fonction des taux de transition $w^\pm(M)$ dans l'espace des spins individuels, les expressions de $H^{(2)}$ et $H^{(1)}$ se simplifient considérablement en repassant aux taux de transition dans l'espace des aimantations (à l'échelle $1/N$ dans la limite $N \rightarrow \infty$). En posant, d'après (2.11)

$$\tilde{W}_{(A)}^\pm = \frac{1 \mp m}{2} w_{(A)}^\pm \quad (2.57)$$

³On peut vérifier que des rotations supplémentaires autour de x et z n'apportent rien, une fois l'opérateur \mathbb{W}_A symétrisé. On aurait également pu se passer de la symétrisation (2.45), à condition de la remplacer par une rotation supplémentaire autour de z .

on obtient :

$$H^{(2)} = 2 \left[\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^- \right]^{\frac{1}{2}} - \tilde{W}^+ - \tilde{W}^- \quad (2.58)$$

$$H^{(1)} = \sqrt{1 - m^2} \partial_m H^{(2)} \quad (2.59)$$

La valeur propre maximale de \mathbb{W}_A est donc donnée par $NH^{(2)}$ pour la valeur de m qui annule $H^{(1)}$ et maximise $H^{(2)}$. Ces conditions équivalent à

$$\frac{1}{N} \psi_A(s) = \max_{-1 \leq m \leq 1} \left\{ 2 \left[\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^- \right]^{\frac{1}{2}} - \tilde{W}^+ - \tilde{W}^- \right\} + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (2.60)$$

et on retrouve bien le principe variationnel (2.26). Dans l'état qui correspond à ce choix de m , on a, d'après (2.47-2.50)

$$\frac{1}{N} \langle M \rangle_s = m + \mathcal{O}(1) \quad (2.61)$$

ce qui donne l'interprétation physique (2.30) du paramètre m .

Les corrections de taille finie s'obtiennent à partir du spectre de l'opérateur $\hat{H}^{(0)}$ défini en (2.51). Il est quadratique en a et a^\dagger

$$\hat{H}^{(0)} = C + Xa^2 + Y(a^\dagger)^2 + 2Za^\dagger a \quad (2.62)$$

En appliquant le résultat de l'annexe F, on obtient

$$\begin{aligned} \psi_A(s) = N \max_{-1 \leq m \leq 1} & \left\{ 2 \left[\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^- \right]^{\frac{1}{2}} - \tilde{W}^+ - \tilde{W}^- \right\} \\ & + \frac{\tilde{W}_A^+ \partial_m \tilde{W}_A^- - \tilde{W}_A^- \partial_m \tilde{W}_A^+}{(\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^-)^{\frac{1}{2}}} \\ & + \left[2(\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^-)^{\frac{1}{2}} \partial_m^2 (\tilde{W}^+ + \tilde{W}^- - 2(\tilde{W}_A^+ \tilde{W}_A^-)^{\frac{1}{2}}) \right]^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(N^{-1}) \end{aligned} \quad (2.63)$$

où les corrections d'ordre 1 (deuxième et troisième lignes de (2.63)) sont calculées pour la valeur même de m qui réalise l'extremum.

2.2 Modèle d'Ising

2.2.1 Transition de phase thermodynamique

Nous passons à l'étude du système de spins d'Ising défini au paragraphe 2.1.1, dont le hamiltonien est donné en (2.1) et la dynamique, en suivant [113], est donnée par les taux de transition de type Glauber (2.3) à la température inverse β . Ce modèle de spins en interaction à portée infinie donne la description la plus simple d'un milieu magnétique sujet à une transition de phase du second ordre en fonction de la température. À la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$), le système présente en haute température ($\beta < \beta_c$, $\beta_c = 1$) une phase désordonnée d'aimantation moyenne $m = \langle M \rangle / N$ nulle, séparée d'une phase ordonnée, en basse température ($\beta > \beta_c$), dont l'aimantation moyenne m est solution de l'équation

$$m = \tanh \beta m \quad (2.64)$$

Le système possède une symétrie par renversement global des spins, qui est brisée pour $\beta > \beta_c$, le système adoptant dans cette phase une aimantation moyenne soit positive, soit négative (correspondant à l'une des deux solutions opposées de (2.64)).

La transition de phase thermodynamique sépare deux phases dont les *configurations* sont de nature différentes : désordonnées pour $\beta < \beta_c$, ordonnées, c'est-à-dire présentant un amas macroscopique de spins orientés dans la même direction, pour $\beta > \beta_c$. Le formalisme thermodynamique présenté dans les sections précédentes permet d'analyser les aspects dynamiques de cette transition, et notamment de représenter directement sa "naissance" en termes des histoires suivies par le système.

2.2.2 Énergie libre dynamique associée à Q_+

Dans la limite des grands N , les taux de transition dans l'espace de l'aimantation totale prennent la forme

$$W^+ = N \frac{1-m}{2} e^{\beta m} \quad (2.65)$$

$$W^- = N \frac{1+m}{2} e^{-\beta m} \quad (2.66)$$

La pression topologique $\psi_+(s)$ est donnée d'après (2.32) à la limite thermodynamique par $\frac{1}{N}\psi_+(s) = -\min_m \mathcal{F}_+(m, s)$ avec

$$\mathcal{F}_+(m, s) = \cosh \beta m - m \sinh \beta m - 2^s (1 - m^2)^{\frac{1-s}{2}} (\cosh \beta m - m \sinh \beta m)^s \quad (2.67)$$

Une analyse élémentaire de cette équation donne les résultats suivants.

Pour les hautes températures (figures 2.1a-2.4a), la pression topologique présente un point de non-analyticité $s_c < 0$, qui sépare deux phases dynamiques.

- Une phase désordonnée (pour $s > s_c$) où l'aimantation moyenne $m_+(s)$ est nulle (figure 2.2a), et la pression topologique s'écrit d'après (2.67)

$$\frac{1}{N}\psi_+(s) = 2^s - 1 \quad (2.68)$$

Cette forme, qui correspond à une distribution poissonnienne de $\frac{1}{N}Q_+$, est similaire à celle des systèmes dont les taux de transition sont uniformes (*cf.* (1.79), où le rapport r/W vaut 2, ce qui correspond aux deux possibilités – augmentation ou diminution – d'évolution de l'aimantation totale M). Elle traduit la nature complètement aléatoire de la dynamique dans cette phase. Les corrections de taille finie, d'après (2.63), s'écrivent

$$\psi_+(s) = N(2^s - 1) + 2^s(1-s)(1-\beta) - 2^{s/2} \sqrt{2^s(1-s(1-\beta)^2) - \beta(2-\beta)} + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (2.69)$$

et ne sont pas poissonniennes.

- Une phase ordonnée (pour $s < s_c$) où l'aimantation moyenne $m_+(s)$ est non nulle, la transition ayant lieu continûment en $s = s_c$ (figure 2.2a). Le passage dans cette phase ordonnée se traduit par une discontinuité de la variance $\frac{1}{Nt}\langle Q_+^2 \rangle_c = 2\psi_+''(s)$

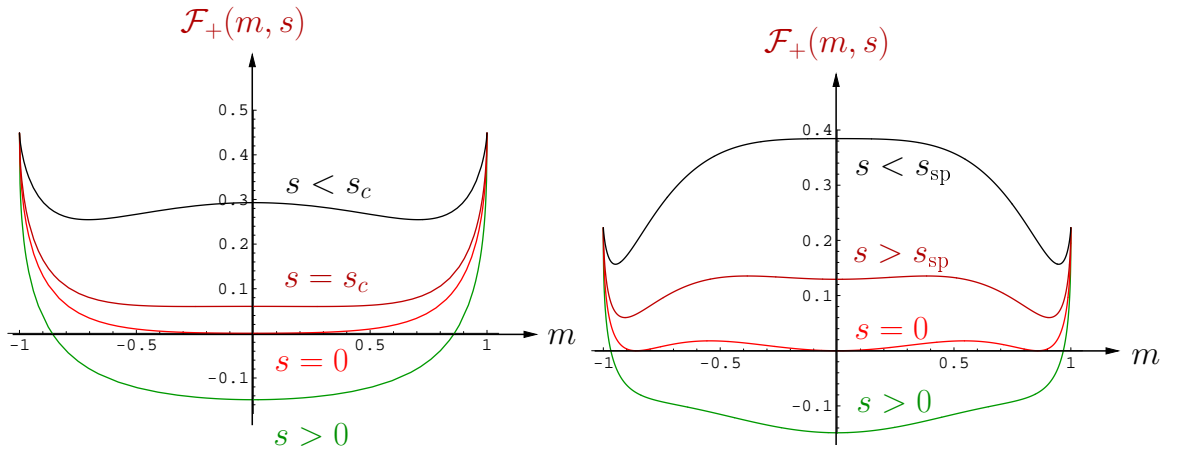


FIG. 2.1 – Énergie libre à la Landau $\mathcal{F}_+(m, s)$ pour le système de spins d'Ising, pour différentes valeurs de s . [(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$). [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$). Les valeurs $m_+(s)$ auxquelles $\mathcal{F}_+(m, s)$ atteint son minimum sont représentées en figure 2.2.

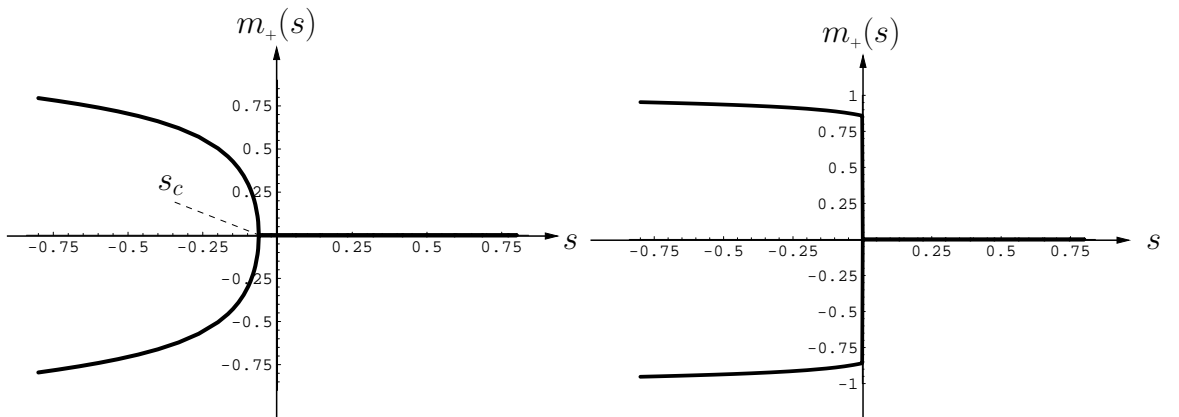


FIG. 2.2 – Aimantation moyenne dans l'état- s $m_+(s)$ pour le système de spins d'Ising. Les deux branches pour $s < s_c$ représentent les deux phases brisées possibles. [(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), l'aimantation moyenne $m_+(s)$ subit une transition continue en $s_c < 0$. [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier est $s_c = 0$ et l'aimantation moyenne est discontinue.

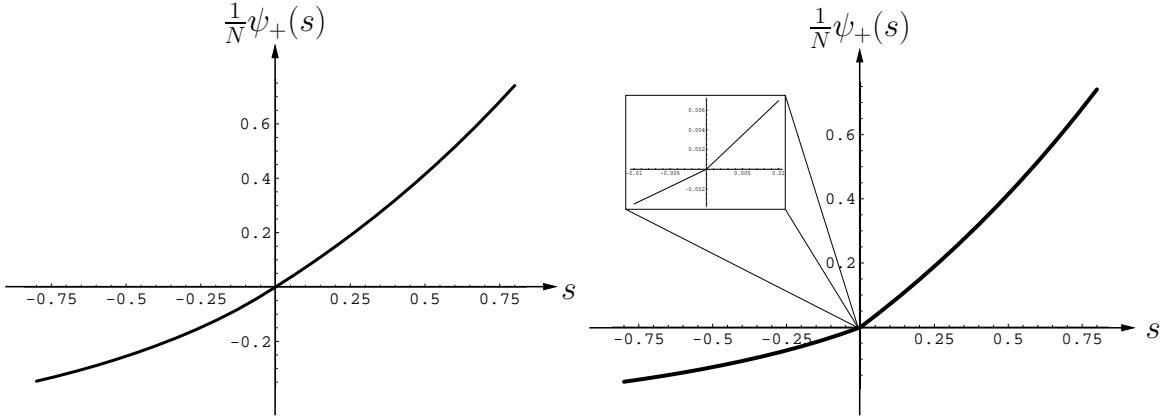


FIG. 2.3 – Pression topologique $\frac{1}{N}\psi_+(s)$ pour le système de spins d’Ising.

[(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), $\psi_+(s)$ est non analytique en $s_c < 0$ (la deuxième dérivée est discontinue, cf. figure 2.4a). [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier est $s_c = 0$ et la singularité est d’ordre 1.

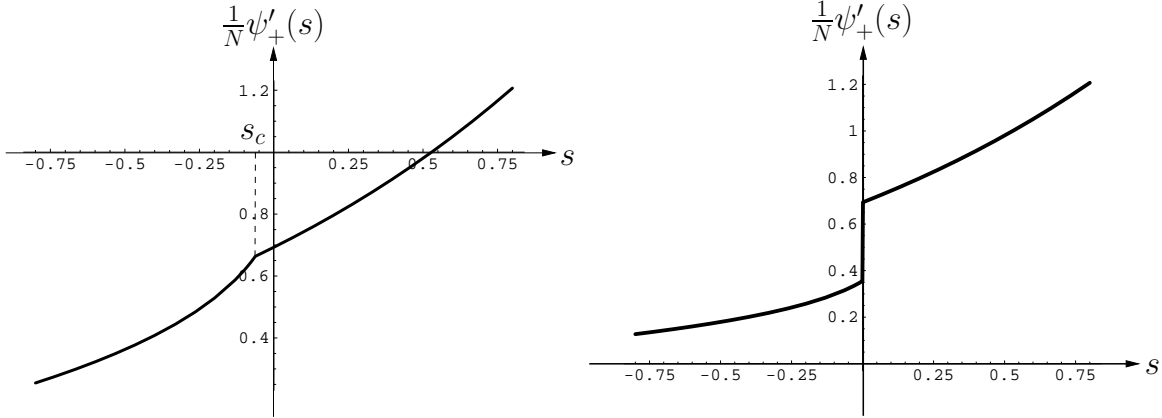


FIG. 2.4 – Dérivée de la pression topologique $\frac{1}{N}\psi'_+(s)$ pour le système de spins d’Ising.

[(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), la dérivée $\psi'_+(s)$ est discontinue en $s_c < 0$. Cette non-analyticité de $\psi_+(s)$ est une signature de la discontinuité de la *variance* de la complexité dynamique dans l’état- s $\frac{1}{Nt}\langle Q_+^2 \rangle_c = 2\psi''_+(s)$ en s_c , à la limite thermodynamique. [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier vaut $s_c = 0$ et la singularité de $\psi_+(s)$ traduit une discontinuité dans la *moyenne* de la complexité dynamique dans l’état- s $\frac{1}{Nt}\langle Q_+ \rangle = -\psi'_+(s)$ en $s = 0$, à la limite thermodynamique.

de la complexité dynamique (figure 2.4a), la pression topologique $\frac{1}{N}\psi_+(s)$ ayant une singularité d'ordre 2 en $s = s_c$ (figure 2.3a). On s'attend à ce que la discontinuité de la variance se transforme pour les systèmes en dimension finie en une divergence (à l'image de ce qui se passe pour les transitions de phase standard).

Pour les basses températures (figures 2.1b-2.4b) la pression topologique présente également la signature d'une transition de phase dynamique, entre une phase ordonnée et une phase désordonnée. À la différence des hautes températures, la transition a lieu au point singulier $s_c = 0$ et est du premier ordre ($m_+(s)$ est discontinu, figure 2.2b).

L'image dynamique qui ressort de ces transitions est la suivante. Plaçons-nous dans la phase de haute température ($\beta < 1$) où l'aimantation moyenne est nulle. On peut classer l'ensemble des histoires possibles par la valeur de leur complexité $q_+ = Q_+/t$. Les histoires ont en moyenne une complexité dynamique $q_+^{\text{eq}} = \frac{1}{Nt}\langle Q_+ \rangle$. Si l'on regarde les histoires de complexité moyenne légèrement différente de q_+^{eq} (pour les grands temps, d'après (1.66), leur statistique est donnée par les états- s avec $s \approx 0$) les configurations visitées sont de même nature que celle de l'état d'équilibre : l'aimantation moyenne $m = M/N$ est nulle. En revanche, les histoires de complexité suffisamment faible, qui correspondent à $s < s_c$, possèdent une aimantation moyenne m non nulle. Diminuons ensuite la température. Au fur et à mesure que β s'approche de β_c , il devient de plus en plus facile de faire naître des histoires qui visitent des configurations d'aimantation non nulle (car $s_c \rightarrow 0$ pour $\beta \rightarrow 1$). Au point critique thermodynamique, ces histoires prennent le dessus et l'emportent pour tout $\beta > \beta_c$.

En résumé, la transition de phase thermodynamique usuelle en $\beta = 1$ est directement responsable de la transition de phase dynamique observée pour tout β . Cette dernière donne de plus une représentation quantitative du scénario des transitions du second ordre, engendrées par les fluctuations.

2.2.3 Énergie libre associée à K

La quantité de type A la plus simple pour caractériser l'activité d'une histoire est son nombre d'événements K , c'est-à-dire son nombre de changements de configurations. L'énergie libre dynamique $\psi_K(s)$ associée à K est donnée d'après (2.31) à la limite thermodynamique par $\frac{1}{N}\psi_K(s) = -\min_m \mathcal{F}_K(m, s)$ avec

$$\mathcal{F}_K(m, s) = \cosh \beta m - m \sinh \beta m - e^{-s} \sqrt{1 - m^2} \quad (2.70)$$

Comme illustré sur les figures 2.5-2.8, la thermodynamique des histoires associée à K donne exactement la même image que celle associée à Q_+ , à la correspondance $s \leftrightarrow -s$ près, nécessaire car $Q_+ < 0$ et $K > 0$. La grandeur K représente l'activité d'une histoire et l'image physique donnée à la fin du paragraphe 2.2.2 reste identique.

Les calculs analytiques peuvent être explicités un peu plus loin sans trop de lourdeur.

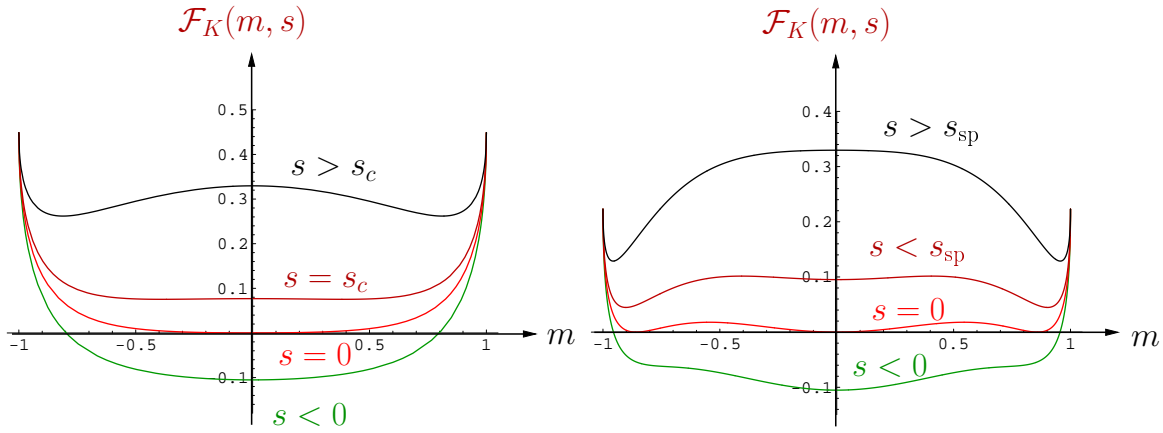


FIG. 2.5 – Énergie libre à la Landau $\mathcal{F}_K(m, s)$ pour le système de spins d'Ising, pour différentes valeurs de s . [(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$). [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$). Les valeurs $m_K(s)$ auxquelles $\mathcal{F}_K(m, s)$ atteint son minimum sont représentées en figure 2.6.

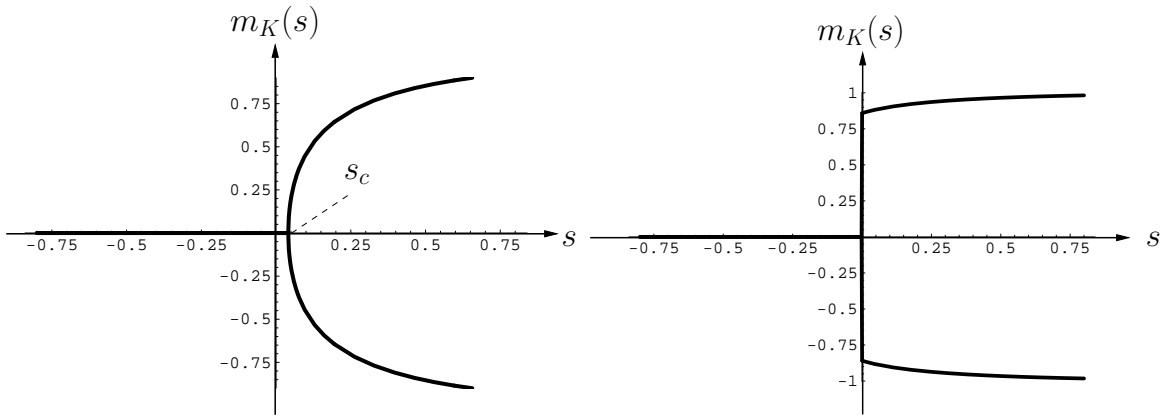


FIG. 2.6 – Aimantation moyenne dans l'état- s $m_K(s)$ pour le système de spins d'Ising. Les deux branches pour $s > s_c$ représentent les deux phases brisées possibles. [(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), l'aimantation moyenne $m_K(s)$ subit une transition continue en $s_c > 0$. [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier est $s_c = 0$ et l'aimantation moyenne est discontinue.

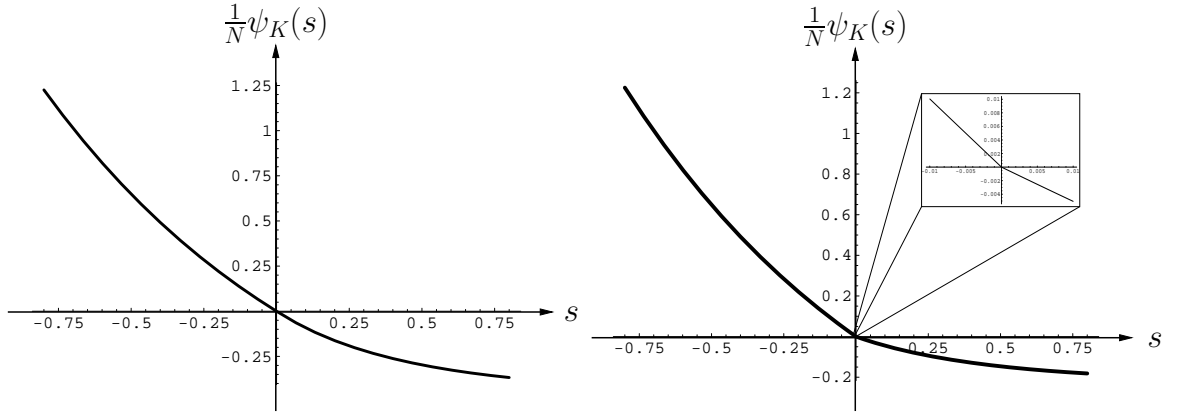


FIG. 2.7 – Énergie libre dynamique $\frac{1}{N}\psi_K(s)$ associée à K pour le système de spins d'Ising. [(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), $\psi_K(s)$ est non analytique en $s_c > 0$ (la deuxième dérivée est discontinue, cf. figure 2.8). [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier est $s_c = 0$ et la singularité est d'ordre 1.

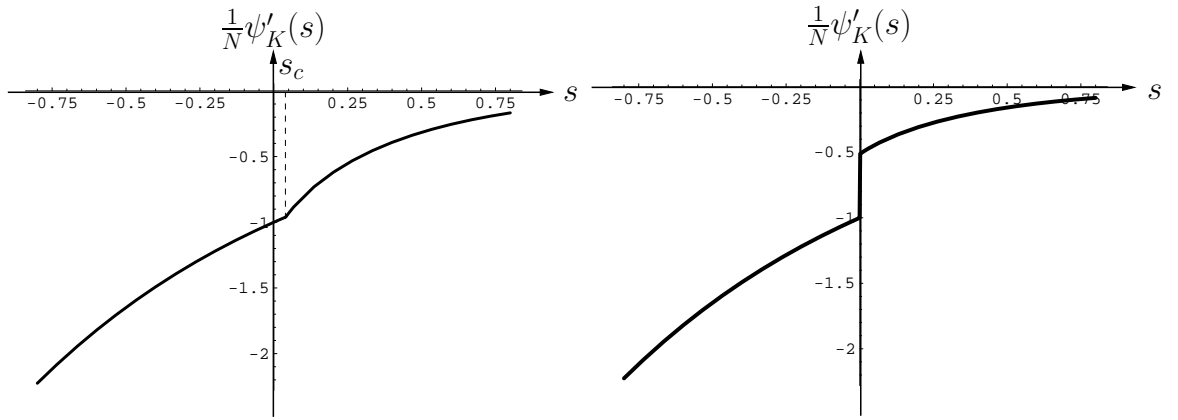


FIG. 2.8 – Dérivée $\frac{1}{N}\psi'_K(s)$ de l'énergie libre dynamique associée à K pour le système de spins d'Ising.

[(a), gauche] En phase haute température ($\beta = 0.8$), la dérivée $\psi''_K(s)$ est discontinue en $s_c > 0$. Cette non-analyticité de $\psi_K(s)$ est une signature de la discontinuité de la *variance* du nombre d'événements dans l'état- s $\frac{1}{Nt}\langle K^2 \rangle_c = 2\psi''_K(s)$ en s_c , à la limite thermodynamique. [(b), droite] En phase basse température ($\beta = 1.5$), le point singulier vaut $s_c = 0$ et la singularité de $\psi_K(s)$ traduit une discontinuité dans la *moyenne* du nombre d'événements dans l'état- s $\frac{1}{Nt}\langle K \rangle = -\psi'_K(s)$ en $s = 0$, à la limite thermodynamique.

L'aimantation moyenne $m_K(s)$ est la solution de

$$m_K \beta \cosh \beta m_K + (1 - \beta) \sinh \beta m_K = \frac{m_K}{\sqrt{1 - m_K^2}} z \quad (2.71)$$

qui minimise $\mathcal{F}_K(m, s)$. L'aimantation nulle $m_K(s) = 0$ est toujours racine de (2.71), et il peut exister deux autres solutions opposées non nulles. Le passage d'une solution nulle à une solution non nulle à une valeur s_c de s est responsable de la singularité de $\psi_K(s)$ (figures 2.7-2.8). En phase basse température ($\beta > 1$, figure 2.6b), $m_K(s) = 0$ l'emporte pour $s < 0$ tandis que $m_K(s) \neq 0$ l'emporte pour $s > 0$: la transition dynamique a lieu au point $s_c = 0$. En phase haute température ($\beta < 1$, figure 2.6a), on trouve que l'aimantation $m_K(s)$ est continue et le point singulier est donné par

$$s_c = -\ln [\beta(2 - \beta)] \quad (2.72)$$

En posant $z = e^{-s}$, on a, pour les phases où $m_K(s) = 0$ l'emporte :

$$\psi_K(z) = (z - 1)N + z(1 - \beta) - \sqrt{z(z - \beta(2 - \beta))} + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (2.73)$$

L'ordre dominant en N correspond à une distribution poissonnienne de K . Pour les phases où $m_K(s) \neq 0$ l'emporte (c'est-à-dire $s > s_c$, cf. figure 2.6), on obtient

$$\begin{aligned} \psi_K(z) = N \left[z \sqrt{1 - m_K^2} - \cosh \beta m_K + m_K \sinh \beta m_K \right] \\ + z \frac{1 - (1 - m_K^2)\beta}{\sqrt{1 - m_K^2}} + \sqrt{\phi_K(z)} \end{aligned} \quad (2.74)$$

avec

$$\begin{aligned} \phi_K(z) = \frac{z^2}{1 - m_K^2} [3 - 6(1 - m_K^2)\beta + 4(1 - m_K^2)^2\beta^2] \\ + \beta z \sqrt{1 - m_K^2} [(2 - \beta) \cosh \beta m_K + \beta m_K \sinh \beta m_K] [1 - 2(1 - m_K^2)\beta] \end{aligned} \quad (2.75)$$

Lorsque $s = 0$ (i.e. $z = 1$), l'équation (2.71) sur $m_K(s)$ est bien sûr résolue par la solution $m_K^{(0)}$ de l'équation de champ moyen

$$m_K^{(0)} = \tanh(\beta m_K^{(0)}) \quad (2.76)$$

En phase basse température, on peut par exemple choisir $m_K^{(0)} > 0$ et $\psi_K(s)$ est donné par (2.74). Il est possible d'effectuer une théorie de perturbation en puissances de s pour $m_K(s)$ et $\psi_K(s)$ en cherchant la solution de (2.71) sous la forme $m_K = m_K^{(0)} + m_K^{(1)}s + \dots$. En posant $c_0(\beta) = \cosh m_K^{(0)}(\beta)$, on trouve les cumulants suivants

$$\frac{1}{Nt} \langle K \rangle = \frac{1}{c_0} + \frac{\beta}{N} \frac{c_0^2(2 - 3\beta) + \beta^2}{2c_0(c_0^2 - \beta)^2} + \mathcal{O}(1/N^2) \quad (2.77)$$

$$\frac{1}{Nt} \langle K^2 \rangle_c = \frac{1}{c_0} + c_0 \frac{c_0^2 - 1}{(c_0^2 - \beta)^2} + \mathcal{O}(1/N) \quad (2.78)$$

$$\frac{1}{Nt} \langle K^3 \rangle_c = \frac{1}{c_0} + 3c_0 \frac{c_0^2 - 1}{(c_0^2 - \beta)^5} [c_0^6 - (1 + \beta)c_0^4 - \beta(1 - 3\beta)c_0^2 - \beta^3] + \mathcal{O}(1/N) \quad (2.79)$$

Ce résultat montre en particulier que, dans cette phase, le nombre d'événements K n'est pas distribué de manière poissonnienne, même à l'ordre dominant en N (si tel était le cas, seule le terme en $1/c_0$ serait présent dans les membres de droite (2.77,2.78,2.79) des cumulants précédents).

2.2.4 Entropie de Kolmogorov-Sinai dans l'état stationnaire

Le modèle d'Ising étudié dans ce chapitre permet également d'illustrer le lien entre la chaoticité de la dynamique dans l'état stationnaire et la valeur de l'entropie KS (associée à l'évolution dans l'espace de l'aimantation totale, c'est-à-dire donnée par $h_{\text{KS}} = -\frac{1}{t}\langle Q_+ \rangle$). Grâce à (1.49), on voit que h_{KS} ne dépend de la température inverse β que par l'intermédiaire de $c = \cosh[\beta m(\beta)]$, où $m(\beta)$ est l'aimantation d'équilibre solution de l'équation de champ moyen (2.64). On trouve :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} h_{\text{KS}} = \begin{cases} \ln 2 & \text{if } \beta < 1 \\ \frac{1}{c} \ln 2 & \text{if } \beta > 1 \end{cases} \quad (2.80)$$

Dans la phase haute température ($\beta < 1$), h_{KS} est constante à l'ordre dominant en N . On obtient les corrections de taille finie en développant (1.49) à l'ordre 0, ce qui donne (figure 2.9) :

$$h_{\text{KS}} - N \ln 2 = -\frac{1 + (\ln 2 - 1)\beta(2 - \beta)}{2(1 - \beta)} \quad (2.81)$$

2.2.5 Entropie de Kolmogorov-Sinai dépendante de l'état

Pour la dynamique à température fixée, on a défini au paragraphe 1.5.7 l'entropie KS $h_{\text{KS}}[P]$ dans un état P qui n'est pas nécessairement l'état stationnaire P_{eq} . Pour le modèle d'Ising étudié ici, $h_{\text{KS}}[P]$ ne dépend de P à l'ordre dominant que par l'intermédiaire de m :

$$\frac{1}{N} h_{\text{KS}}[P] = e^{\beta m} \frac{1 - m}{2} \ln \left[1 + \frac{1 + m}{1 - m} e^{-2\beta m} \right] + e^{-\beta m} \frac{1 + m}{2} \ln \left[1 + \frac{1 - m}{1 + m} e^{2\beta m} \right] \quad (2.82)$$

Si l'état P possède une aimantation moyenne m plus faible que m_{eq} , l'entropie correspondante $h_{\text{KS}}[P]$ est plus faible que h_{KS} , comme attendu pour une dynamique dans un état plus "figé" (figure 2.10).

L'entropie KS renversée dans le temps $h_{\text{KS}}^R[P]$ dans l'état P s'écrit :

$$\frac{1}{N} h_{\text{KS}}^R[P] = e^{\beta m} \frac{1 - m}{2} \ln \left[1 + \frac{1 - m}{1 + m} e^{2\beta m} \right] + e^{-\beta m} \frac{1 + m}{2} \ln \left[1 + \frac{1 + m}{1 - m} e^{-2\beta m} \right] \quad (2.83)$$

D'après (1.108), où $\sigma_f = 0$ (le bilan détaillé est vérifié), $h_{\text{KS}}[P]$ et $h_{\text{KS}}^R[P]$ sont égales dans l'état d'équilibre (c'est-à-dire pour $m = m_{\text{eq}}$ d'après (2.14)), aussi bien en haute température (figure 2.11) qu'en basse température (figure 2.12).

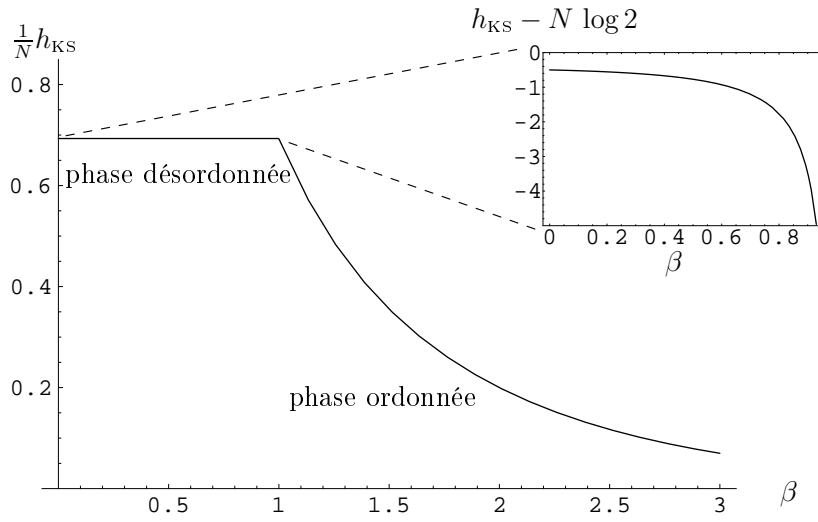


FIG. 2.9 – Entropie de Kolmogorov-Sinai h_{KS} dans l'état stationnaire, en fonction de β . Dans la phase ordonnée ($\beta > 1$), les variations de h_{KS} sont d'ordre N , alors qu'elles sont d'ordre 1 dans la phase désordonnée.

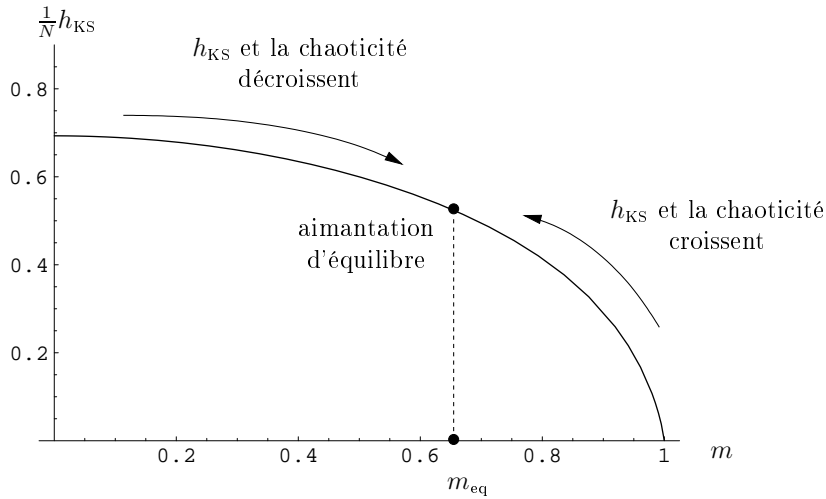


FIG. 2.10 – Entropie de Kolmogorov-Sinai $h_{\text{KS}}[P]$ dans un état P de magnétisation moyenne m à température fixée, dans la phase ordonnée ($\beta = 1.2$).

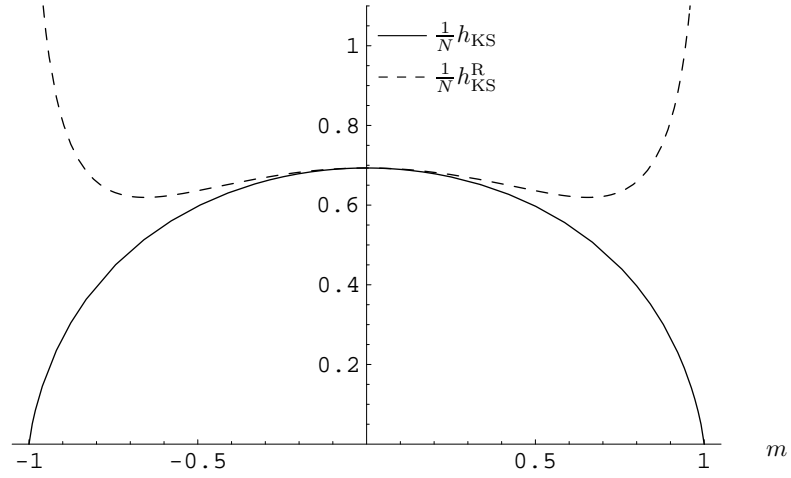


FIG. 2.11 – Entropie de Kolmogorov-Sinai directe et renversée dans le temps dans un état d'aimantation m , dans la phase ordonnée ($\beta = 0.8$). Comme attendu $h_{KS} \leq h_{KS}^R$. Ces deux entropies dynamiques ne sont égales que pour l'aimantation d'équilibre $m_{eq} = 0$.

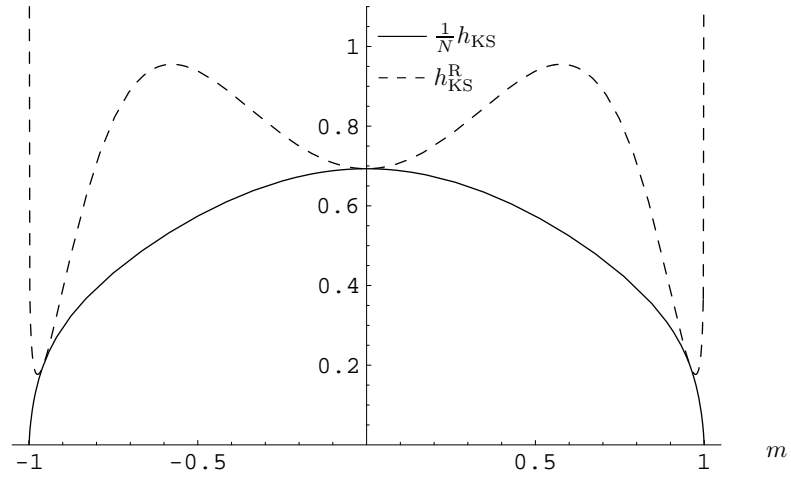


FIG. 2.12 – Entropie de Kolmogorov-Sinai directe et renversée dans le temps dans un état d'aimantation m , dans la phase désordonnée ($\beta = 2$). Comme attendu, $h_{KS} \leq h_{KS}^R$. Les deux entropies dynamiques ne sont égales que pour les magnétisation d'équilibre $m_{eq} \simeq \pm 0.956$ où à $m = 0$, qui est instable.

2.3 Modèle de Potts

2.3.1 Dynamique

Le modèle de Potts est une généralisation du modèle d'Ising étudié dans la section précédente, où chaque spin individuel σ_i prend désormais q valeurs possibles, au lieu de deux. Pour un système de N spins, son hamiltonien s'écrit

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} [q\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1] = -\frac{1}{2N} \left[\sum_{k=1}^q qN_k^2 - N^2 \right] = -\frac{1}{2} N \left[q \sum_{k=1}^q \theta_k^2 - 1 \right]$$

où N_k est le nombre de spins dans l'état k ($1 \leq k \leq q$) et $\theta_k = \frac{N_k}{N}$ est la fraction de spins dans l'état k . Si un spin saute de l'état k à l'état k' , la variation d'énergie correspondante est

$$\Delta H = -\frac{q}{N} [N_{k'} - N_k + 1] = -q [\theta_{k'} - \theta_k + 1/N] \quad (2.84)$$

Le modèle est muni d'une dynamique de Glauber en temps continu, de taux de transition

$$W(\sigma_i = k \rightarrow \sigma_i = k') = e^{-\beta \frac{\Delta H}{2}} \quad (2.85)$$

vérifiant le bilan détaillé avec l'état d'équilibre

$$P_{\text{eq}}(\boldsymbol{\sigma}) \propto e^{-\beta H} \quad (2.86)$$

Pour $q = 2$, on retrouve le modèle similaire au modèle d'Ising étudié dans la partie 2.2. Ici, nous allons également nous intéresser à la dynamique à l'échelle des nombres d'occupation $\mathbf{N} = \{N_k\}_{1 \leq k \leq q}$. Dans ce jeu de variables, les taux de transition prennent la forme

$$W(\mathbf{N} \rightarrow \mathbf{N}') = N_n e^{\beta \frac{q}{2N} [N_m - N_n + 1]} \quad (2.87)$$

avec $\mathbf{N}' = \{N_1, \dots, N'_n = N_n - 1, \dots, N'_m = N_m + 1, \dots, N_q\}$, et la distribution d'équilibre s'écrit

$$P_{\text{eq}}(\mathbf{N}) = \frac{1}{Z} \frac{N!}{\prod_{k=1}^q N_k!} e^{-\beta H} \quad (2.88)$$

Le système présente à la limite thermodynamique une transition de phase en $\beta = \beta_c$, qui sépare une phase désordonnée ($\beta < \beta_c$) où tous les états sont occupés uniformément, d'une phase ordonnée ($\beta > \beta_c$) où l'un des états est occupé de manière prédominante, brisant la symétrie initiale entre les états. Nous étudions dans le paragraphe suivant la transition dynamique qui lui est associée.

2.3.2 Thermodynamique des histoires associée à K

Comme pour le modèle d'Ising, les thermodynamiques données par Q_+ et K donnent des résultats équivalents (paragraphe 2.2.2 et 2.2.3). Nous nous restreindrons à la description donnée par K , qui est plus simple à traiter. En généralisant l'approche du paragraphe 2.1.3,

nous allons déterminer l'énergie libre dynamique $\psi_K(s)$ à l'ordre dominant. Le point de départ est l'opérateur d'évolution associé à K , dont les éléments s'écrivent (cf. 2.17)

$$(\mathbb{W}_K)_{\mathbf{N}', \mathbf{N}} = z \sum_n \sum_{m \neq n} \delta_{N'_n, N_n-1} \delta_{N'_m, N_m+1} \left(\prod_{\substack{k \neq n \\ k \neq m}} \delta_{N'_k, N_k} \right) W(\mathbf{N} \rightarrow \mathbf{N}') - \left(\prod_{k=1}^q \delta_{N'_k, N_k} \right) r(\mathbf{N}) \quad (2.89)$$

avec $z = e^{-s}$ et $r(\mathbf{N}) = \sum_{\mathbf{N}' \neq \mathbf{N}} W(\mathbf{N} \rightarrow \mathbf{N}')$. En utilisant une transformation similaire à (2.18-2.19), on obtient à nouveau un opérateur symétrisé

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathbf{N}', \mathbf{N}} &= z \sum_n \sum_{m \neq n} \delta_{N'_n+1, N_n} \delta_{N'_m-1, N_m} \left(\prod_{\substack{k \neq n \\ k \neq m}} \delta_{N'_k, N_k} \right) [(N'_n+1)N'_m]^{1/2} \\ &\quad - \left(\prod_{k=1}^q \delta_{N'_k, N_k} \right) \sum_n \sum_{m \neq n} N'_n e^{\beta \frac{q}{2N} [N'_m - N'_n + 1]} \end{aligned}$$

dont le spectre, et en particulier la plus grande valeur propre $\psi_K(s)$, est égal à celui de \mathbb{W}_K . Pour grand N , et en dehors de la transition $\beta = \beta_c$, on s'attend à ce que le vecteur propre correspondant à $\psi_K(s)$ ait des éléments de la forme

$$P(\mathbf{N}) \sim e^{Nf(\boldsymbol{\theta})} \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\theta} = \{\theta_k\}_{1 \leq k \leq q},$$

ce qui est déjà le cas pour $z = 1$ ($s = 0$), *i.e.* pour la distribution d'équilibre

$$f_{\text{eq}}(\boldsymbol{\theta}) = \beta \frac{q}{2} \sum_{k=1}^q \theta_k^2 \quad (2.90)$$

Dans la limite $N \rightarrow \infty$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{N}'} (\tilde{\mathbb{W}}_K)_{\mathbf{N}, \mathbf{N}'} P(\mathbf{N}') &= z \sum_n \sum_{m \neq n} [(N_n+1)N_m]^{\frac{1}{2}} e^{Nf(\theta_1, \dots, \theta_n + \frac{1}{N}, \dots, \theta_m - \frac{1}{N}, \dots, \theta_q)} \\ &\quad - \sum_n \sum_{m \neq n} N_n e^{\beta \frac{q}{2N} [N_m - N_n + 1]} e^{Nf(\theta_1, \dots, \theta_q)} \end{aligned} \quad (2.91)$$

$$= N e^{Nf(\theta_1, \dots, \theta_q)} \sum_n \sum_{m \neq n} \left\{ z \sqrt{\theta_n \theta_m} e^{\frac{\partial f}{\partial \theta_n} - \frac{\partial f}{\partial \theta_m}} - \theta_n e^{\beta \frac{q}{2} [\theta_m - \theta_n]} \right\} \quad (2.92)$$

Comme dans (2.22), la plus grande valeur propre s'obtient en maximisant sur P la quantité

$$\frac{\langle P | \tilde{\mathbb{W}}_K | P \rangle}{\langle P | P \rangle} = \frac{\sum_{\mathbf{N}} N e^{2Nf(\theta_1, \dots, \theta_q)} \sum_n \sum_{m \neq n} \left\{ z \sqrt{\theta_n \theta_m} e^{\frac{\partial f}{\partial \theta_n} - \frac{\partial f}{\partial \theta_m}} - \theta_n e^{\beta \frac{q}{2} [\theta_m - \theta_n]} \right\}}{\sum_{\mathbf{N}} e^{2Nf(\theta_1, \dots, \theta_q)}} \quad (2.93)$$

Pour chaque fonction f , dans la limite des grands N , la somme est dominée par le maximum de f , pour lequel $\frac{\partial f}{\partial \theta_k} = 0$ pour tout $1 \leq k \leq q$. Autrement dit :

$$\frac{1}{N} \psi_K(s) = \max_{\boldsymbol{\theta}} \sum_n \sum_{m \neq n} \left[z \sqrt{\theta_n \theta_m} - \theta_n e^{\beta \frac{q}{2} [\theta_m - \theta_n]} \right] \quad (2.94)$$

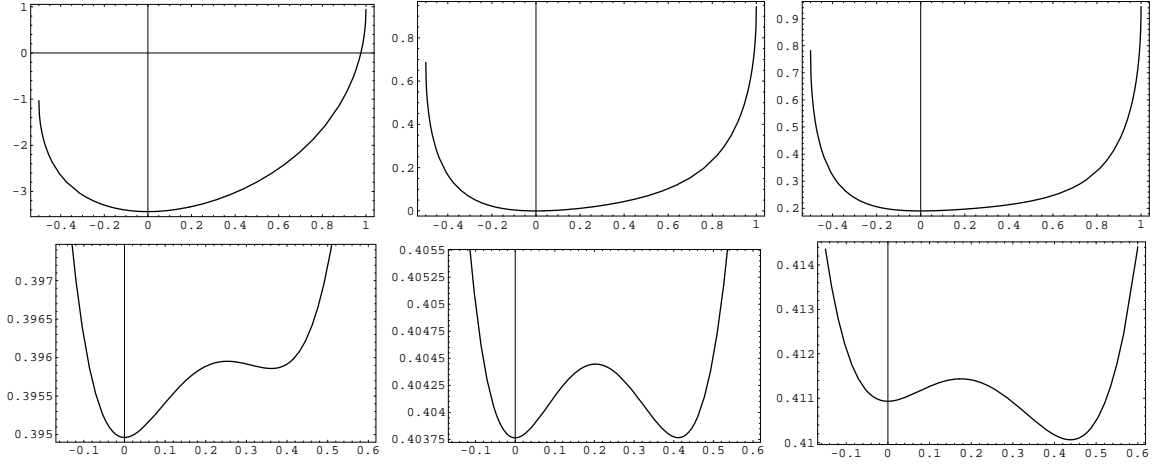


FIG. 2.13 – Énergie libre à la Landau $\mathcal{F}_K(m, s)$ en fonction de m pour le modèle de Potts, pour différentes valeurs de s ($s = -1, 0, 0.1, 0.22, 0.2255, 0.23$), dans la phase haute température $\beta = .5 < \beta_c$. On observe l'apparition d'une transition de phase dynamique du premier ordre en $s = s_c \approx 0.2255$.

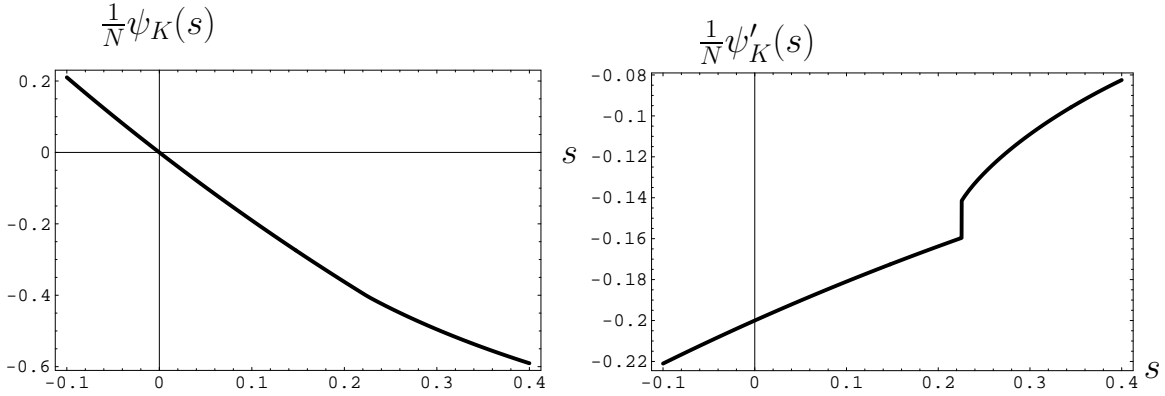


FIG. 2.14 – Énergie libre dynamique $\psi_K(s)$ et sa dérivée $\psi'_K(s)$ pour le modèle de Potts en phase haute température ($\beta = 0.5 < \beta_c$). Une transition dynamique du premier ordre a lieu en $s = s_c \approx 0.2255$ (pour le modèle d'Ising en haute température, la transition était du second ordre, cf. figure 2.4).

2.3.3 Brisure de symétrie

Pour toute température, le système présente une transition de phase dynamique (ce que l'on savait déjà pour $q = 2$). Comme au point critique thermodynamique β_c [99], la transition dynamique s'accompagne d'une brisure de la symétrie de permutation entre les états. Dans la phase brisée, un état particulier (par exemple $k = 1$) possède un nombre d'occupation N_1 différent des autres occupations $(N_k)_{k>1}$. L'état du système peut se décrire en fonction d'un paramètre d'ordre $m \in [-1/(q-1), 1]$ tel que $\theta_1 = \frac{1+(q-1)m}{q}$ et $\theta_k = \frac{1-m}{q}$ pour $k > 1$. Dans la phase non brisée, on a $\theta_1 = \theta_k$ et $m = 0$.

D'après (2.94), la fonction génératrice des cumulants de K s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\psi_K(s)}{N} = \max_m \left\{ 2 \frac{q-1}{q} z \sqrt{(1-m)[1+(q-1)m]} + \frac{(q-1)(q-2)}{q} (z-1)(1-m) \right. \\ \left. - \frac{q-1}{q} [1+(q-1)m] e^{-\frac{\beta q}{2} m} - \frac{q-1}{q} (1-m) e^{\frac{\beta q}{2} m} \right\} \end{aligned} \quad (2.95)$$

Pour trois états ($q = 3$), les résultats en basse température sont similaires à ceux du modèle d'Ising ($q = 2$) : on observe une transition dynamique en $s_c = 0$, entre deux phases, l'une symétrique ($m = 0$ pour $s > 0$), l'autre brisée ($m \neq 0$ pour $s \leq 0$). En haute température, on observe toujours une transition en $s = s_c > 0$ (figure 2.13), mais celle-ci est du premier ordre (figure 2.14).

2.4 Processus de contact

2.4.1 Motivations

Nous passons à l'étude du système du Processus de Contact (CP) sur un graphe complet, défini au paragraphe 2.1.1 et dont la dynamique est donnée par les taux de transition (2.4). Introduit par Harris [72] en 1974, ce modèle a été réexaminé assez récemment en champ nul ($h = 0$). Dickman et Vidigal [40] ont étudié en détail une de ses propriétés remarquables : l'existence d'une transition de phase hors d'équilibre qui sépare un état absorbant, vide de particule (pour les faibles λ) d'un état actif (pour $\lambda > \lambda_c$), à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$). Sur le graphe complet le taux de branchement critique vaut $\lambda_c = 1$. En taille finie, l'état d'équilibre est absorbant pour toute valeur de λ , et, pour $\lambda > \lambda_c$, les configurations de densité non nulle n'ont qu'une durée de vie finie. La durée de vie de cet état actif, en taille finie, a été étudiée par Deroulers et Monasson [39]. En substance, la transition de phase du processus de contact se range dans la classe d'universalité de la percolation dirigée. Elle apparaît donc comme un cas d'école de transition de phase hors d'équilibre (pour une revue cf. par exemple [73]), auquel on a naturellement envie d'appliquer le formalisme thermodynamique. Il faut noter d'ailleurs que de telles transitions vers un état absorbant sont parfois invoquées dans la physique de la transition vitreuse [118, 109, 128].

2.4.2 État stationnaire

La dynamique peut être décrite à l'échelle du nombre total de particule n : comme dans (2.13), on a

$$\begin{cases} W(n \rightarrow n-1) = n \\ W(n \rightarrow n+1) = (N-n)(\lambda n/N + h) \end{cases} \quad (2.96)$$

Rappelons d'abord les principales propriétés de l'état stationnaire en champ nul ($h = 0$). Pour tout N fini, l'état stationnaire est l'état vide. L'évolution temporelle du nombre moyen de particules s'écrit

$$\partial_t \langle n \rangle = \left\langle (N-n) \frac{\lambda n}{N} - n \right\rangle \quad (2.97)$$

Comme les interactions ont une portée infinie (les sites sont tous voisins entre eux), l'approche de champ moyen est valide à la limite thermodynamique (n et N tendent vers l'infini, avec $\rho = n/N$ fixé). Dans l'état stationnaire, (2.97) devient donc

$$\rho [\lambda(1-\rho) - 1] = 0 \quad (2.98)$$

À la limite thermodynamique, il existe donc deux régimes de densité possibles, en fonction de la valeur de λ . Pour $\lambda \leq 1$, l'état stationnaire est l'état absorbant, tandis que le système atteint presque sûrement un état quasi-stationnaire de densité non nulle ρ pour $\lambda > 1$. La densité stationnaire est donnée par

$$\rho = 1 - \frac{1}{\lambda}, \quad (2.99)$$

Pour passer outre l'état absorbant en taille finie, nous travaillerons à h non nul. Dans l'état d'équilibre correspondant, la densité moyenne ρ est la seule solution positive de

$$\lambda\rho + h = \rho/(1-\rho) \quad (2.100)$$

2.4.3 Pression topologique

Dans la limite thermodynamique (n et N grands, $\rho = n/N$ fixé) les taux de transition (2.96) dans l'espace du nombre total de particules prennent la forme

$$W^- = N\rho \quad (2.101)$$

$$W^+ = N(1-\rho)(\lambda\rho + h) \quad (2.102)$$

La pression topologique $\psi_+(s)$ est donnée d'après l'égalité (2.32), traduite dans le langage des particules (au lieu des spins) à l'ordre dominant en N par $\frac{1}{N}\psi_+(s) = -\min_\rho \mathcal{F}_+(\rho, s)$ avec

$$\mathcal{F}_+(\rho, s) = \rho + (1-\rho)(\lambda\rho + h) - 2[\rho(1-\rho)(\lambda\rho + h)]^{1/2} [\rho + (1-\rho)(\lambda\rho + h)]^s \quad (2.103)$$

On obtient les résultats suivants :

- (i) Pour une faible valeur $h > 0$ du champ : l'état stationnaire est actif, de densité $\rho_{eq} = \rho_+(0)$ non nulle, donnée par la solution (2.100) (qui correspond également au minimum et au zéro de $\mathcal{F}_+(\rho, s)$, figure 2.15a). Pour $s > 0$, les histoires ont une plus grande complexité dynamique (donnée $-\frac{1}{Nt}\langle Q_+ \rangle_s = \psi'_+(s)$, figure 2.18a) que dans l'état stationnaire et les états explorés ont une densité de particules $\rho_+(s) > \rho_{eq}$ (figure 2.16a). Une plus grande densité autorise en effet plus d'événements par unité de temps. Dans la région $s < 0$, qui explore des histoires de complexité dynamique plus faible que dans l'état stationnaire, on observe une transition de phase dynamique du premier ordre, la dérivée $\psi'_+(s)$ de la pression topologique étant discontinue en un point singulier $s_c < 0$ (figures 2.17a, 2.18a). La complexité moyenne diminue brutalement (figure 2.18a) : pour $s < s_c$, les histoires sont beaucoup moins actives. La transition se reflète aussi dans la densité moyenne $\rho_+(s)$ des configurations explorées, qui est plus faible dans la phase inactive.
- (ii) Dans la limite de champ nul ($h \rightarrow 0$) : le scénario précédent est conservé, le point singulier s_c tendant vers 0 (figures 2.15b-2.18b). Dans la phase inactive ($s < s_c$), la densité de particules devient nulle (le système tombe dans l'état absorbant).

2.4.4 Thermodynamique des histoires associée à K

Comme pour le modèle d'Ising étudié précédemment, les résultats sur $\psi_K(s)$ sont en correspondance qualitative avec ceux de $\psi_+(s)$, suivant $s \leftrightarrow -s$.

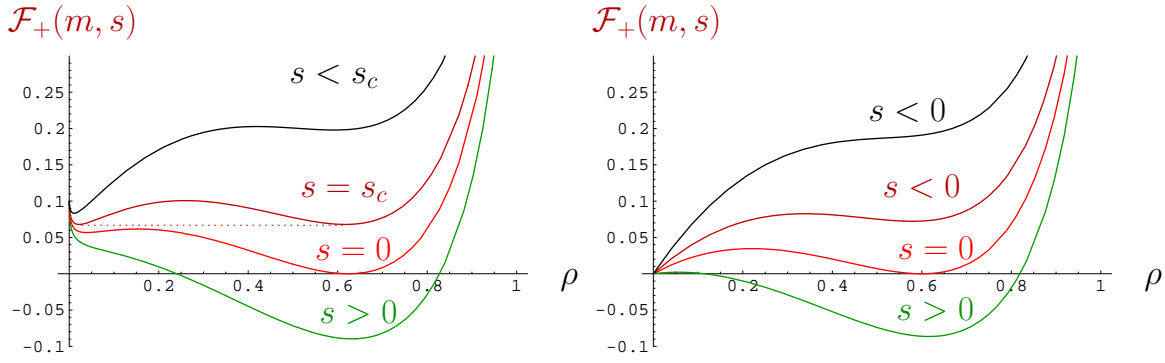


FIG. 2.15 – Énergie libre à la Landau $\mathcal{F}_+(\rho, s)$ pour le processus de contact, pour différentes valeurs de s , à $\lambda = 2.5$. Les valeurs $m_+(s)$ auxquelles $\mathcal{F}_+(m, s)$ atteint son minimum sont représentées en figure 2.16. [(a), gauche] En champ non nul ($h = 0.1$). [(b), droite] Dans la limite de champ nul ($h \rightarrow 0$).

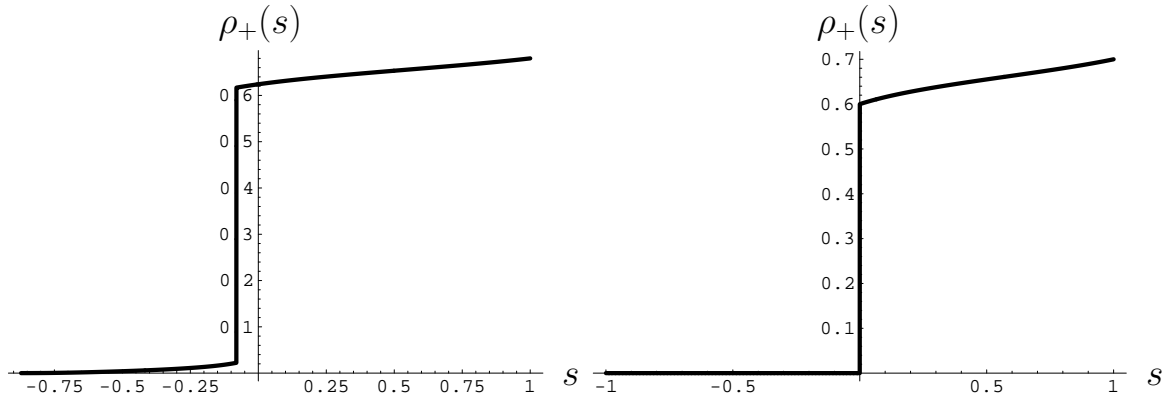


FIG. 2.16 – Densité de particules moyenne dans l'état- s $\rho_+(s)$ pour le processus de contact ($\lambda = 2.5$). [(a), gauche] En champ non nul ($h = 0.1$), la densité moyenne $\rho_+(s)$ indique la transition du premier ordre en $s_c < 0$. La densité de particules dans l'état inactif ($s < s_c$) est plus faible que dans l'état actif ($s > s_c$), mais n'est pas nulle. [(b), droite] Dans la limite de champ nul ($h \rightarrow 0$), la transition a lieu en $s_c = 0$. La densité de particules dans l'état inactif ($s < s_c$) tend vers 0 avec h . Pour $h = 0$, on retrouve l'état absorbant complètement vide de particule.

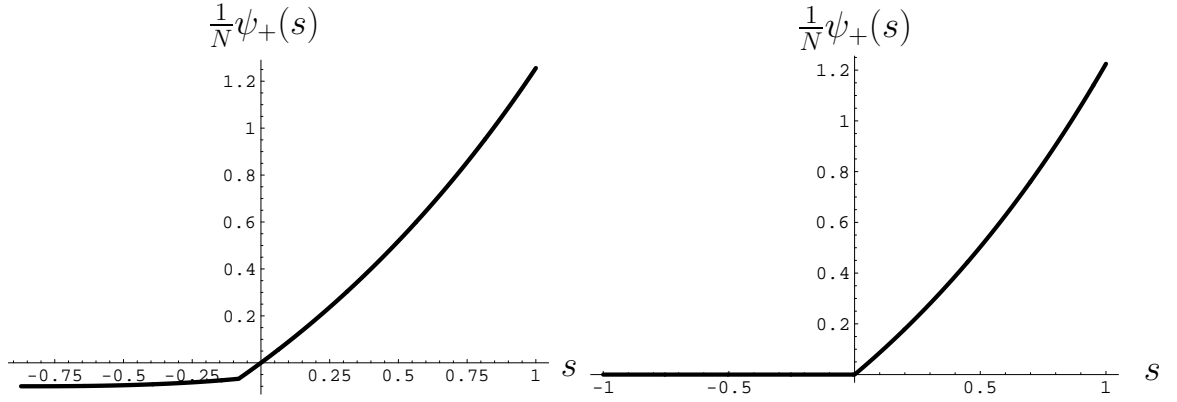


FIG. 2.17 – Pression topologique $\frac{1}{N}\psi_+(s)$ pour le processus de contact ($\lambda = 2.5$).

[(a), gauche] En champ non nul ($h = 0.1$), $\psi_+(s)$ est non analytique en $s_c < 0$ (la deuxième dérivée est discontinue, cf. figure 2.18a). [(b), droite] Dans la limite de champ nul ($h \rightarrow 0$), le point singulier s_c tend vers 0.

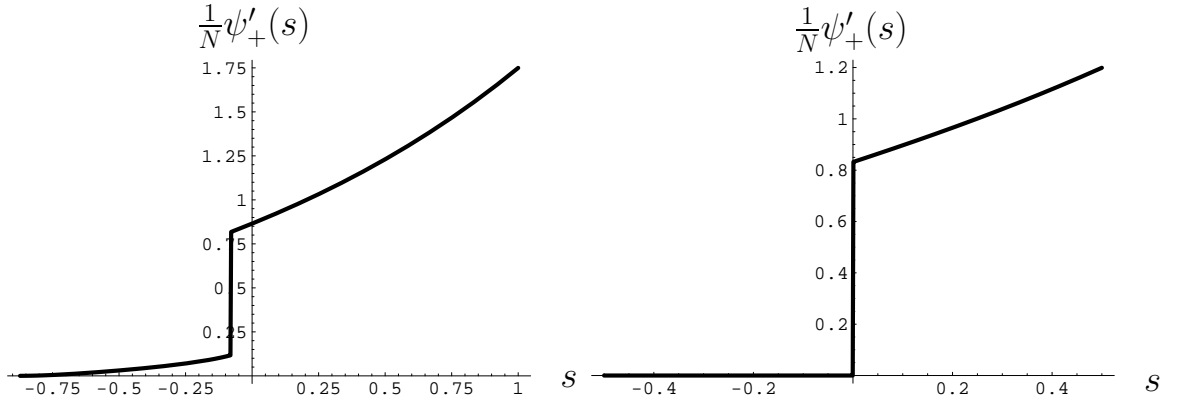


FIG. 2.18 – Dérivée de la pression topologique $\frac{1}{N}\psi'_+(s)$ pour le processus de contact ($\lambda = 2.5$). En champ non nul [(a), gauche, $h = 0.1$] comme dans la limite de champ nul [(b), droite, $h \rightarrow 0$], la singularité de $\psi_+(s)$ traduit une discontinuité dans la *moyenne* de la complexité dynamique dans l'état- s $\frac{1}{Nt}\langle Q_+ \rangle = -\psi'_+(s)$ en $s = s_c$, à la limite thermodynamique.

Chapitre 3

Grandes déviations en temps continu : méthode numérique

Nous présentons une procédure numérique pour étudier les propriétés physiques d'un système dans l'ensemble- s , développée en collaboration avec Julien Tailleur. Les résultats correspondent à la publication **P5**.

3.1 Description de la méthode

3.1.1 Motivations

L'étude des fluctuations d'observables extensives en temps du type A (comme K , Q_+ , ou Q_S) est à la base de la thermodynamique des histoires exposée au chapitre 1. Quantitativement, il s'agit d'étudier la fonction de grandes déviations $\pi(a)$ associée à la probabilité de mesurer une valeur a à t de l'observable A sur un temps long :

$$\text{Prob}(A/t = a, t) \sim e^{t\pi(a)} \quad \text{avec } t \rightarrow \infty \quad (3.1)$$

Comme on l'a vu, il est plus facile de considérer la fonction de grandes déviations $\psi_A(s)$ associée à la fonction génératrice des moments de A :

$$Z_A(s, t) = \sum_A e^{-sA} P(A, t) = \langle e^{-sA} \rangle \sim e^{t\psi_A(s)} \quad \text{avec } t \rightarrow \infty \quad (3.2)$$

Ces fonctions et leur interprétation ont été introduites au paragraphe 1.4.2.

La définition même de ces fonctions de grandes déviations rend leur détermination difficile, car la probabilité d'observer une valeur de A/t loin de sa moyenne décroît exponentiellement en temps. Déterminer directement $\pi(a)$ pose donc un problème d'échantillonnage – il faut observer un grand nombre de trajectoires pour obtenir des valeurs rares de A . Pour les systèmes évoluant avec une dynamique de Markov en temps discret, Giardinà, Kurchan et Peliti ont proposé [67] une méthode numérique du type Monte Carlo qui s'affranchit de cette difficulté, la fonction de grandes déviations étant obtenue par la mesure de la valeur

moyenne d’une observable. Toutefois, les systèmes physiques évoluent continûment en temps : l’application de cet algorithme à des modèles continus en temps passe donc par le choix d’un pas de temps arbitraire dt pour discrétiser la dynamique. La valeur optimale de dt est déterminée par un équilibre entre l’efficacité de l’algorithme et l’erreur due à la discrétisation. Dans l’idéal, dt doit être plus petit que toute échelle de temps dans le système, mais des valeurs de dt trop petites ne font qu’allonger inutilement la durée de simulation, la plupart des pas de temps étant perdus à rejeter des événements. Cette difficulté est déjà présente dans les algorithmes de Monte Carlo standard, et devient inévitable lorsqu’on étudie une fonction de grandes déviations. En effet, même un système qui possède une seule échelle de temps dans l’état stationnaire présentera en général des échelles de temps assez différentes dans ses grandes déviations, suivant la nature des histoires rares qui les génèrent – ce qui rend le choix de dt ardu. Un exemple simple de cette situation est donné par les modèles de trafic routier : dans l’état stationnaire, l’échelle de temps est globalement fixe, mais peut varier d’un facteur N égal au nombre de voitures présentes dans le système, si l’on compare les histoires embouteillées (un nombre fini de voitures peut bouger) et les histoires fluides (où un nombre extensif de voitures peut bouger).

Dans ce chapitre, nous présentons une procédure inspirée de [67] où les difficultés de la discrétisation en temps sont éliminées en se plaçant directement en temps continu. Pour les phénomènes décrits dans le cadre des systèmes dynamiques, la détermination de fonctions de grandes déviations fait également appel à des méthodes de clonage (voir [125, 126] pour des exemples de systèmes à grand nombre de degré de liberté).

3.1.2 Une évolution qui ne conserve pas la probabilité

On s’intéresse à des systèmes munis d’une dynamique markovienne en temps continu, avec les notations du chapitre 1 (partie 1.3 pour la dynamique, partie 1.4 pour l’observable A). Nous allons évaluer l’énergie libre dynamique $\psi_A(s)$ associée à A . Comme on l’a vu au paragraphe 1.4.2, il est en général possible de reconstruire $\pi(a)$ à partir de $\psi_A(s)$. À l’instar de [67], nous allons obtenir la fonction $\psi_A(s)$ par la mesure de la valeur moyenne d’une observable bien choisie, dans une nouvelle dynamique. L’outil principal qui permet d’arriver à ce résultat est la transformée de Laplace (1.58) $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$ de la probabilité jointe $P(\mathcal{C}, A, t)$ d’observer le système dans une configuration \mathcal{C} au temps t , ayant mesuré une valeur A de l’observable (1.44). Elle obéit à l’équation d’évolution (1.59), qui peut se récrire :

$$\partial_t \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \underbrace{\sum_{\mathcal{C}'} W_s(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}', s, t) - r_s(\mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}_{\text{partie conservant la probabilité}} + \underbrace{[r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})] \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)}_{\text{partie ne conservant pas la probabilité}} \quad (3.3)$$

où l’on a introduit une nouvelle dynamique de taux de transition dépendants de s

$$W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = e^{-s\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (3.4)$$

dont le taux d'échappement depuis la configuration \mathcal{C} est :

$$r_s(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') . \quad (3.5)$$

Nous avons vu au paragraphe 1.4.3 que $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ et $Z_A(s, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ évoluent exponentiellement en temps avec un taux $\psi_A(s)$, qui s'interprète comme le taux de perte (ou de gain) de probabilité de l'équation d'évolution (1.59). Dans l'écriture (3.3) de l'équation d'évolution, on a séparé deux parties, l'une conservant la probabilité, l'autre, diagonale, ne la conservant pas. Toute la subtilité, comme dans [67], consiste à construire un algorithme qui tienne compte de ces deux types d'évolution.

Remarquons au passage une autre conséquence de la décomposition (3.3). D'après (1.76), on voit que

$$\langle e^{-sA} \rangle = \langle e^{\int_0^t \delta r_s} \rangle_{\substack{\text{dynamique} \\ s\text{-modifiée}}} \quad (3.6)$$

En d'autres termes, la fonction de partition dynamique $\langle e^{-sA} \rangle$ associée à A s'écrit comme celle associée à $\int_0^t \delta r_s$ dans la dynamique modifiée donnée par les taux (3.4-3.5). Ceci permet de faire le lien entre les grandes déviations d'observables de type A , qui varient discontinûment au cours du temps, et celles d'observables de type $\int_0^t \delta r_s$, qui varient continûment.

3.1.3 Algorithme de clonage

Si la partie non conservative $\delta r(\mathcal{C}) = r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})$ de (3.3) est indépendante de \mathcal{C} , la "probabilité" non conservée $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ diminue (ou augmente) exponentiellement en temps à un taux constant δr (comme pour une désintégration radioactive), ce qui permet d'ailleurs de retrouver (1.79) pour $A = Q_+$. Dans le cas général où $\delta r(\mathcal{C})$ dépend de \mathcal{C} , la dynamique est constituée d'une succession de changements de configuration déterminés par les taux modifiés (3.4), et d'évolutions exponentielles de $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$, avec un taux $r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})$, entre les changements de configuration.

Une construction explicite de ces deux évolutions parallèles est donnée dans l'annexe A (voir en particulier la forme explicite de $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$, éq. A.19). Pour représenter cette évolution, on considère, comme en diffusion Monte Carlo [2], un grand nombre de copies du système qui évoluent en parallèle avec la dynamique s -modifiée (3.4-3.5). À chaque changement de configuration d'une copie c

- (1) c saute de sa configuration \mathcal{C} vers une autre configuration \mathcal{C}' tirée avec probabilité $W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')/r_s(\mathcal{C})$;
- (2) l'intervalle de temps Δt que la copie c passera dans l'état \mathcal{C}' avant de changer à nouveau de configuration est tiré suivant la loi de Poisson (1.27) de paramètre $r_s(\mathcal{C}')$;
- (3) la copie c est soit tuée, soit clonée avec un taux $\mathcal{Y}(\mathcal{C}') = e^{\Delta t [r_s(\mathcal{C}') - r(\mathcal{C}')]}$: en posant $y = \lfloor \mathcal{Y}(\mathcal{C}') + \varepsilon \rfloor$ où ε est uniformément distribué sur $[0, 1]$
 - a) si $y = 0$, la copie c est tuée,

- b) si $y = 1$, il ne se passe rien,
- c) si $y > 1$, la copie c est copiée $y - 1$ fois.

À chaque étape de cette procédure, le nombre total de copies du système est modifié par un facteur $X = \frac{\mathcal{N}+y-1}{\mathcal{N}}$, \mathcal{N} étant le nombre total de copies avant l'étape. Ce facteur traduit l'évolution exponentielle en temps de $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t)$. Tant que le nombre total $\mathcal{N}(t)$ de copies à l'instant t est grand, par construction (d'après A.19), le nombre $\mathcal{N}(\mathcal{C}, t)$ de copies dans l'état \mathcal{C} à l'instant t vaut

$$\mathcal{N}(\mathcal{C}, t) = \mathcal{N}(\mathcal{C}, 0) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) \quad (3.7)$$

Ainsi, pour t grand, $Z_A(s, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ est simplement donné par l'augmentation de la population totale :

$$Z_A(s, t) = \frac{\mathcal{N}(t)}{\mathcal{N}(0)} \quad (3.8)$$

Tel quel, l'algorithme entraîne la disparition ou l'explosion du nombre total de copies du système. Pour maintenir leur nombre constant, on remplace les points $a)$, $b)$, $c)$ de la 3^{ème} étape par :

- (3') a) si $y = 0$, la copie c est remplacée par une autre copie tirée au hasard,
- b) si $y = 1$, rien ne se passe,
- c) si $y > 1$, $y - 1$ copies tirées au hasard sont remplacées par c avec probabilité $\frac{\mathcal{N}}{\mathcal{N}+y-1}$.

Pour déterminer $\psi_A(s, t)$, il suffit de conserver tous les facteurs $X = \frac{\mathcal{N}'+y-1}{\mathcal{N}'}$, \mathcal{N}' étant cette fois le nombre total de copies, conservé. On a en effet :

$$\frac{1}{t} \ln X_1 \dots X_{\mathcal{K}} = \frac{1}{t} \ln \mathcal{N}(t) \sim \psi_A(s) \quad \text{pour} \quad t \rightarrow \infty \quad (3.9)$$

où \mathcal{K} est le nombre total d'événements entre 0 et t , incluant les changements de configurations et les étapes de clonage.

Par construction, dans la nouvelle dynamique (1), (2), (3') à nombre de copies constant, le nombre $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t)$ de copies dans l'état \mathcal{C} à l'instant t vaut $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) = \mathcal{N}(\mathcal{C}, t) / \mathcal{N}(t)$. Ainsi, d'après (1.62), (3.7) et (3.8), $\mathcal{N}'(\mathcal{C}, t)$ ne dépend plus de t aux grands temps et donne une représentation de l'état- s (paragraphe 1.4.3)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) = \tilde{P}(\mathcal{C}, A) \quad (3.10)$$

En particulier, la mesure $\langle \mathcal{O} \rangle_s$ d'une observable \mathcal{O} dans l'état- s peut se mesurer numériquement comme la moyenne de \mathcal{O} sur l'ensemble des clones

$$\langle \mathcal{O} \rangle_s = \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(\mathcal{C}) \mathcal{N}'(\mathcal{C}, t) \quad (3.11)$$

Ceci est également généralisable à une observable \mathcal{O} qui dépend de l'histoire complète entre 0 et t (une telle valeur de \mathcal{O} étant attachée à chaque clone).

3.1.4 Intégration thermodynamique

Le calcul direct de $\psi_A(s)$ par (3.9) est par nature bruité, à cause de la taille finie de population des copies. Pour atténuer ce bruit, on peut se servir de la relation (1.65), qui permet de reconstruire $\psi_A(s)$ à partir de sa dérivée $\psi'_A(s) = -\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle A \rangle_s$. Numériquement, il suffit de mesurer $\langle A \rangle_s$:

$$\psi_A(s) = -\frac{1}{t} \int_0^s ds' \langle A \rangle_{s'} \quad (3.12)$$

L'intégration réduit le bruit. Cette relation doit toutefois être utilisée avec précaution autour d'une transition de phase dynamique du premier ordre (la forte variation de $\psi'_A(s)$ autour du point singulier nécessite un échantillonnage important en s).

3.1.5 Une généralisation supplémentaire

Dans le cas d'une observable un peu plus générale (paragraphe 1.4.5) de type B (équ. 1.72), on voit que la fonction de grandes déviations $\psi_b(s) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \langle e^{-sB} \rangle$ s'obtient par le même algorithme que précédemment, le facteur de clonage devenant

$$\mathcal{Y}_C = e^{b(C) + \Delta t [r_s(C') - r(C)]} \quad (3.13)$$

Les taux de transitions W_s et r_s ne sont pas modifiés.

3.2 Premiers exemples

3.2.1 Processus d'Exclusion Symétrique (SEP)

Comme premier test de l'algorithme précédent, on étudie ici la fonction de grandes déviations du courant total Q dans le processus d'exclusion symétrique (SEP) [122] avec conditions aux limites périodiques. Le système est constitué de N particules qui diffusent sur un réseau en dimension 1, de taille L . Chaque particule peut sauter avec un taux 1 vers sa droite ou vers sa gauche, si le site d'arrivée est vide. Le courant total Q augmente de 1 à chaque saut à droite et diminue de 1 à chaque saut à gauche.

Comme dans d'autres processus d'exclusion [34, 35, 93], la fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ est extensive en L pour s fini, et on s'intéressera à la fonction intensive $\frac{1}{L} \psi_Q(s)$, à la limite thermodynamique (N et L grands, la densité $\rho = N/L$ étant fixée). La moyenne du courant est nulle (les sauts sont symétriques), mais sa variance est finie et $\psi_Q(s)$ s'écrit pour s faible [122] :

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = \rho(1 - \rho)s^2 + \mathcal{O}(Ls^4) \quad (3.14)$$

Dans ce régime, les fluctuations sont gaussiennes et l'évaluation numérique donne des résultats en parfait accord avec le développement (3.14) (figure 3.1b). Pour de plus grandes valeurs de s (cf. la relation 7.67 et la figure 7.5 pour les expressions analytiques dans le régime $s \gg 1$), les fluctuations sont non gaussiennes (figure 3.1a), et correspondent à de très grandes déviations du courant.

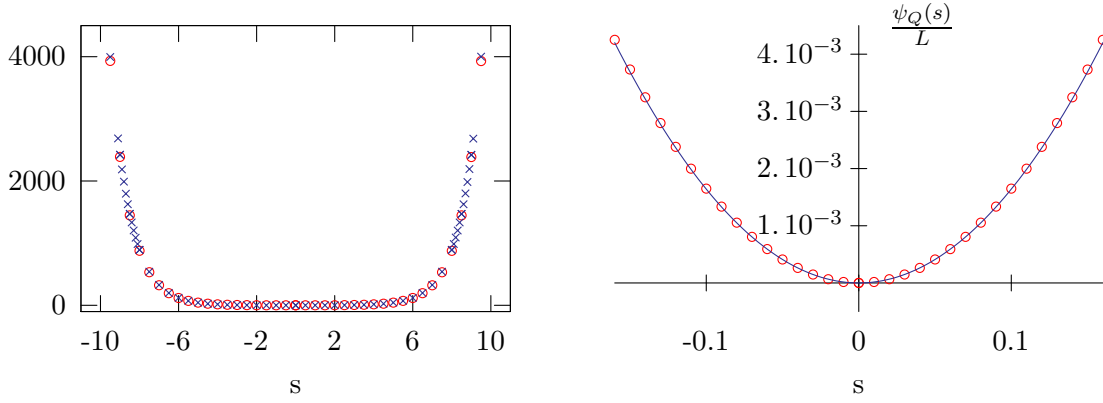


FIG. 3.1 – Évaluation numérique de $\frac{1}{L}\psi_Q(s)$ pour le SEP ($N = 200$, $L = 400$).

[(a) : gauche] Comparaison entre l'évaluation directe de $\psi_Q(s)$ (croix bleues) et le résultat de l'intégration thermodynamique (ronds rouges).

[(b) : droite] Comparaison entre le résultat numérique (ronds rouges) et le développement (3.14), valide pour faible s (ligne continue).

La mesure directe de $\psi_Q(s)$ est également comparée au résultat de l'intégration thermodynamique (figure 3.1a). Les deux évaluations sont en accord, en tenant compte des incertitudes.

3.2.2 Processus d'Exclusion Asymétrique (ASEP)

Nous considérons maintenant les déviations du courant dans le processus d'exclusion asymétrique (ASEP) [122], en conditions aux limites périodiques. Le réseau est identique à celui du SEP, mais la dynamique mène maintenant le système hors d'équilibre : chaque particule saute avec un taux D_L vers sa gauche et D_R vers sa droite, si le site d'arrivée est vide. Pour $D_L \neq D_R$, le système est traversé par un courant de particules non nul dans l'état stationnaire : à la limite thermodynamique, $\frac{1}{t}\langle Q \rangle \equiv q^{\text{st}} = L\rho(1-\rho)(D_R - D_L)$. La fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ (cf. figure 3.2a pour une évaluation numérique) est symétrique autour de $\frac{1}{2}E$ (avec $E = \ln \frac{D_L}{D_R}$), d'après le théorème de fluctuation $\psi_Q(E - s) = \psi_Q(s)$.

Pour $D_L > D_R$ ($D_L = 1.2$, $D_R = 0.8$ dans les données des figures 3.2 et 3.3) le courant stationnaire q^{st} est négatif. La branche $s > E/2$ correspond à des déviations où le courant moyen est négatif, tandis que $s < E/2$ correspond à des déviations positives (rappelons que $\psi'_Q(s) = -\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t}\langle Q \rangle_s$). La procédure numérique proposée dans ce chapitre permet également de visualiser les configurations qui contribuent, dans l'état- s , à imposer une valeur moyenne du courant $\frac{1}{t}\langle Q \rangle_s$ différente de q^{st} .

- Pour les grands courants (c'est-à-dire $|s| \gg E$ et Q d'ordre N), le courant est rendu maximal par les configurations qui possèdent le moins d'amas de particules possible (figure 3.2b) : le profil moyen est plat, avec une densité moyenne N/L .
- Pour les faibles courants (c'est-à-dire $|s| \approx E$ et Q d'ordre 1), le système visite des configurations formées d'un amas de taille macroscopique. Le profil moyen prend la forme d'un choc suivi d'un anti-choc (figures 3.3a-d). Leur asymétrie favorise un léger

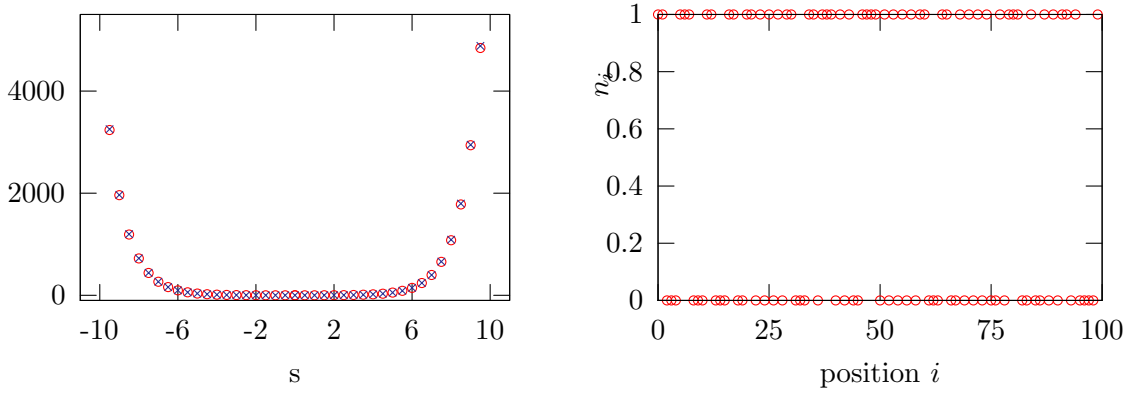


FIG. 3.2 – [(a) : gauche] Fonction de grandes déviations $\frac{1}{L}\psi_Q(s)$ pour l'ASEP ($L = 400$ sites, $N = 200$ particules). Les taux de saut sont $D_L = 1.2$ et $D_R = 0.8$, d'où $E/2 \simeq -0.2$. Les croix bleues et les cercles rouges correspondent respectivement à l'évaluation directe de $\frac{1}{L}\psi_Q(s)$ et au résultat de l'intégration thermodynamique. [(b) : droite] Une configuration typique ($n_i = 0$ ou 1 est le nombre d'occupation au site i) pour une très grande déviation de courant ($|s| \gg E$, *i.e.* $|\frac{1}{t}\langle Q \rangle_s| \gg q^{\text{st}}$) : le profil est uniforme. Ici, $L = 100$, $N = 50$.

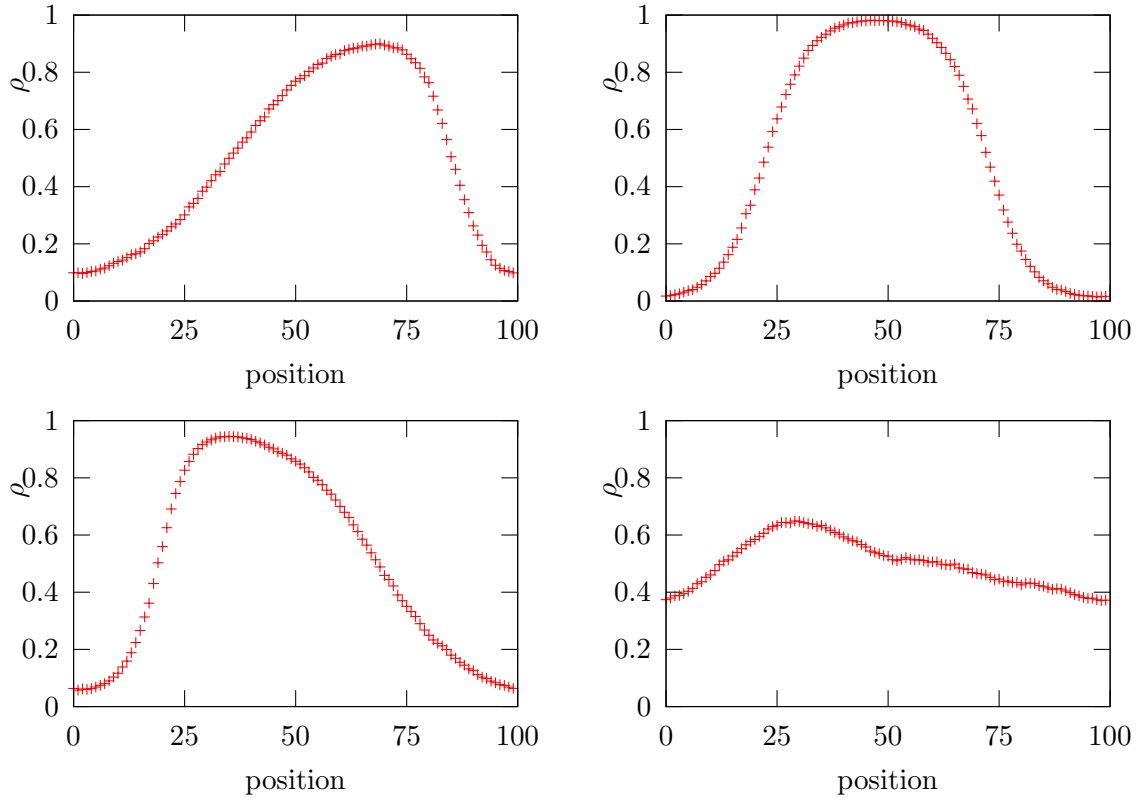


FIG. 3.3 – Profil moyen de l'ASEP (avec $L = 100$, $N = 50$, $D_L = 1.2$ et $D_R = 0.8$ d'où $E/2 \simeq -0.2$) pour différentes valeurs de s autour de $E/2$. [(a) : haut, gauche] Pour $s = -0.1 > E/2$, le courant moyen est négatif (les particules vont majoritairement vers la gauche), comme dans l'état stationnaire. [(b) : haut, droite] Pour $s \simeq -0.2 = E/2$, le courant moyen est nul. [(c) : bas, gauche] Pour $s = -0.30 > E/2$, le courant moyen est positif. [(d) : bas, droite] Pour $s = -0.35 > E/2$, le système développe des profils instationnaires, qui annoncent la transition vers un profil uniforme.

courant moyen du côté le moins pentu.

La transition entre ces deux régimes est de même nature que celle étudiée par Bodineau et Derrida dans le cas des processus d'exclusion faiblement et totalement asymétriques [19].

3.2.3 Processus de Contact (CP) en dimension 1

Nous avons étudié dans la partie 2.4 le processus de contact (CP) sur un graphe complet. Nous considérons ici le CP en dimension 1. Chaque site i d'un réseau unidimensionnel de taille L est soit vide ($n_i = 0$) soit occupé par une particule ($n_i = 1$). La dynamique est la suivante : les particules s'annihilent avec un taux 1, tandis que les sites vides i se remplissent avec un taux

$$W_{\text{création}} = \lambda(n_{i-1} + n_{i+1}) + h \quad (3.15)$$

où λ et h sont correspondent aux taux déjà définis en champ moyen. Nous examinons ici l'énergie libre dynamique associée au nombre d'événements K . En champ moyen (paragraphe 2.4.4), nous savons déjà que l'énergie libre correspondante $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ est singulière en $s_c > 0$ pour $h > 0$ à la limite thermodynamique.

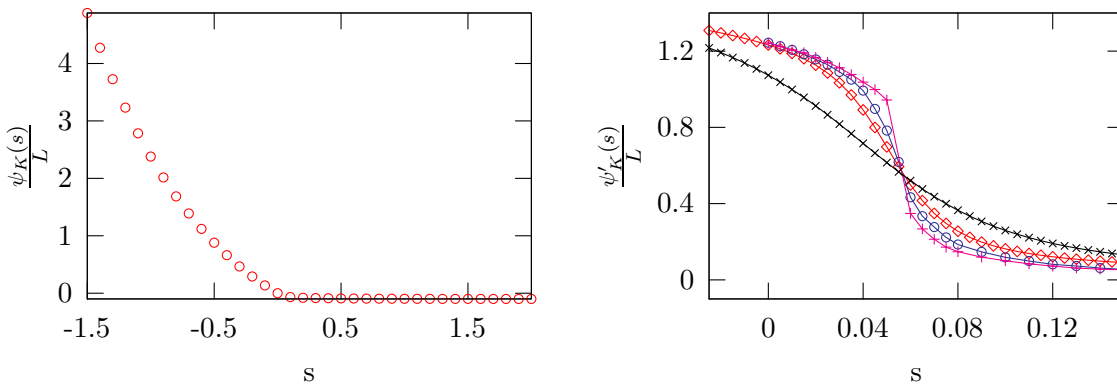


FIG. 3.4 – [(a) : gauche] Tracé de la fonction de grandes déviations $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ associée au nombre d'événements K dans le processus de contact ($\lambda = 3.5$) avec un champ non nul ($h = 0.1$) pour $L = 120$ sites. Les deux branches, séparées pour L grand par un point singulier $s_c \simeq 0.057$, correspondent aux deux phases actives et inactives de la dynamique. [(b) : droite] L'arrivée de la transition de phase dynamique en s_c pour $L \rightarrow \infty$ est illustrée sur le comportement de $-\psi'_K(s) = \frac{1}{L}\langle K \rangle_s$ en taille finie, pour différentes tailles de système (noir : $L = 4$, rouge : 8, en bleu : 15, en violet : 50).

En utilisant l'algorithme décrit dans ce chapitre, on montre que cette transition de phase dynamique existe toujours en dimension 1, à la limite thermodynamique. Comme en champ moyen, on obtient que $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ est indépendant de L pour L grand. La fonction $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ (figure 3.4a) présente deux branches qui correspondent aux histoires fortement et faiblement actives.

La non-analyticité de $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ apparaît, à la limite $L \rightarrow \infty$, sous la forme d’une discontinuité de $\frac{1}{L}\psi'_K(s) = -\frac{1}{Lt}\langle K \rangle_s$. Celle-ci se manifeste clairement dans le comportement de taille finie de $-\frac{1}{L}\psi'_K(s)$ (Figure 3.4b), qui permet en particulier d’estimer la valeur point singulier à $s_c \sim 0.057$. Autour de ce point, la dynamique présente une superposition d’histoires “plus actives” et “moins actives”, pour lesquelles l’approche en temps continu proposée dans ce chapitre est particulièrement appropriée.

Chapitre 4

Transition de phase dynamique dans les systèmes vitreux

Nous effectuons une statistique des histoires sur quelques exemples de modèles de verres. Nous montrons que la coexistence de phase dynamique de ces systèmes correspond à l'existence de plusieurs minima dans le paysage d'énergie libre dynamique à la Landau. Les résultats ont été obtenus en collaboration avec Juan P. Garrahan, Robert Jack, Estelle Pitard, Kristina van Duijvendijk et Frédéric van Wijland, et correspondent en partie à la publication **P6**.

4.1 Dynamiques cinétiquement contraintes

4.1.1 Motivations

Un grand nombre de phénomènes naturels peuvent être rassemblés dans une même classe, celle des *phénomènes vitreux*, qui ont la particularité de ne pas pouvoir être compris si on se restreint à une approche purement statique (*i.e.* à la thermodynamique de Boltzmann). Ainsi, des systèmes aussi divers que les verres (de nos vitres), les empilements granulaires compacts, les colloïdes, les gaz de sphères dures polydisperses, les systèmes de spins désordonnés présentent (au moins) *deux* échelles de temps caractéristiques très différentes :

- (i) l'une, souvent inaccessible expérimentalement, correspond au temps que ces systèmes mettent (mettraient) pour atteindre leur état d'équilibre – plusieurs milliards d'années pour le verre des vitres et vitraux [135] – et qui dépend considérablement de la température (figure 4.1) ;
- (ii) l'autre, expérimentale, correspond au temps que le système met pour “relaxer” après une faible perturbation.

Ces systèmes, dans la pratique, n'atteignent donc pas leur état d'équilibre, restent bloqués dans un état (de “quasi-équilibre” [55]) qui varie très lentement dans le temps, et présentent toute une phénoménologie originale (“violation” de FDR, vieillissement) qui diffère en tout

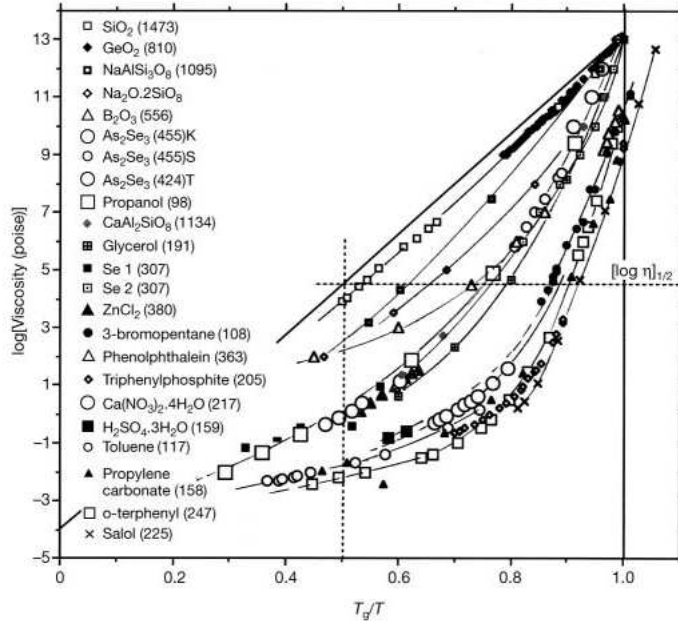


FIG. 4.1 – Viscosité (en unités logarithmiques) de certains matériaux de type vitreux en fonction de la température inverse. La viscosité, directement reliée au temps de retour à l'équilibre, change sur plus de 10 ordres de grandeur sur une faible gamme de température. Figure tirée de Martinez et Angell [98].

point de celle d'un état transitoire proche de l'équilibre. Ce ralentissement de la dynamique, au moins dans les cas les plus simples [114], est également différent du ralentissement critique, présent au voisinage d'un point critique dans les transitions de phase standard.

L'application du formalisme thermodynamique à ce type de systèmes est assez ardue (voir [1] pour une étude numérique). On se limitera dans ce chapitre à l'étude de quelques modèles de verres, dans le cadre stochastique détaillé au long des chapitres précédents.

4.1.2 Modèles cinétiquement contraints

Au niveau théorique, les exemples les plus simples de systèmes présentant certaines caractéristiques vitreuses sont donnés par les modèles cinétiquement contraints (*cf.* Ritort et Sollich [111] pour une revue exhaustive).

Nous considérerons des modèles définis sur un réseau euclidien en dimension d , de volume $V = L^d$, en conditions aux limites périodiques. Chaque site i est soit "peu mobile" ($n_i = 0$), soit "mobile" (ou "excité") ($n_i = 1$). C'est cette différence de mobilité entre régions distinctes qui constitue l'ingrédient essentiel pour produire un ralentissement dynamique, en induisant des contraintes cinétiques. Les taux de transition entre ces deux états se mettent sous la forme

$$W(n_i \rightarrow 1 - n_i) = C_i W_0(n_i \rightarrow 1 - n_i) \quad (4.1)$$

où $W_0(n_i \rightarrow 1 - n_i)$ est le taux de transition en l'absence de contrainte et C_i représente une

“contrainte cinétique”. Les taux non contraints sont les taux de Glauber à la température $1/\beta$ correspondant à l’énergie triviale

$$H = \sum_i n_i \quad (4.2)$$

La contrainte cinétique C_i est un facteur qui interdit ou autorise certaines transitions entre états. Elle traduit la manière dont les zones immobiles défavorisent le mouvement dans leur voisinage, à l’inverse des zones mobiles, qui le favorisent.

Nous allons en particulier étudier le modèle de Fredrickson-Andersen (FA) [56, 57] et ses variantes. La contrainte cinétique C_i est une fonction du nombre de voisins excités f_i du site i . De manière générale, C_i est nul pour $f_i = 0$ (c’est l’image physique de “facilitation” : seules les zones excitées peuvent exciter leur voisinage). La contrainte la plus simple consiste à prendre $C_i = 0$ si $f_i = 0$ et $C_i = 1$ si $f_i \geq 1$. Nous considérerons également le choix $C_i = f_i$, qui revient qualitativement au même [111], et permet de bien formuler une limite de champ moyen aux grandes dimensions. Pour toute transition $n_i \rightarrow 1 - n_i$, la contrainte C_i agit de la même manière sur la transition $(n_i = 0) \rightarrow (n_i = 1)$ que $(n_i = 1) \rightarrow (n_i = 0)$: on voit ainsi que les dynamiques contrainte (taux W) et non contrainte (taux W_0) vérifient toutes deux le bilan détaillé par rapport à la distribution d’équilibre $P^{\text{eq}} \propto e^{-\beta H}$. Enfin, notons que les taux de transition s’écrivent explicitement

$$\begin{cases} W((n_i = 0) \rightarrow (n_i = 1)) = \zeta c C_i \equiv k C_i \\ W((n_i = 1) \rightarrow (n_i = 0)) = \zeta(1 - c) C_i \equiv k' C_i \end{cases} \quad (4.3)$$

où $c = \langle n_i \rangle = (1 + e^\beta)^{-1}$ est la concentration d’excitation à l’équilibre, et ζ est l’unité de temps de la dynamique de Glauber. Dans ce qui suit, on utilisera plutôt le vocabulaire des taux de création k et d’annihilation k' définis dans (4.3).

Il n’y a pas de transition de phase thermodynamique à température non nulle dans le modèle FA [131]. Il existe par ailleurs un état complètement isolé, l’état vide d’excitation ($n_i = 0$ pour tout site i), qui n’interviendra pas par la suite – il est impossible de l’atteindre depuis un état non vide, et impossible d’en sortir. De nombreuses variantes du modèle FA existent [111]. Nous étudierons la plus simple d’entre elles, le modèle East [78, 100], pour lequel un site ne peut changer d’état que si son voisin de gauche est excité (en dimension d , la “gauche” est définie par rapport à une direction arbitraire fixée).

4.2 Transition de phase dynamique

4.2.1 Résultats en dimension finie

La dynamique des modèles cinétiquement contraints possède un ingrédient clef pour notre analyse des phénomènes vitreux : les taux de transition vérifient le bilan détaillé par rapport à une même distribution d’équilibre P^{eq} triviale *en l’absence et en présence de contrainte*. Sachant qu’en l’absence de contrainte la dynamique ne présente pas de caractéristiques vitreuses, on voit dès maintenant que celles-ci ne peuvent être comprises en étudiant seulement

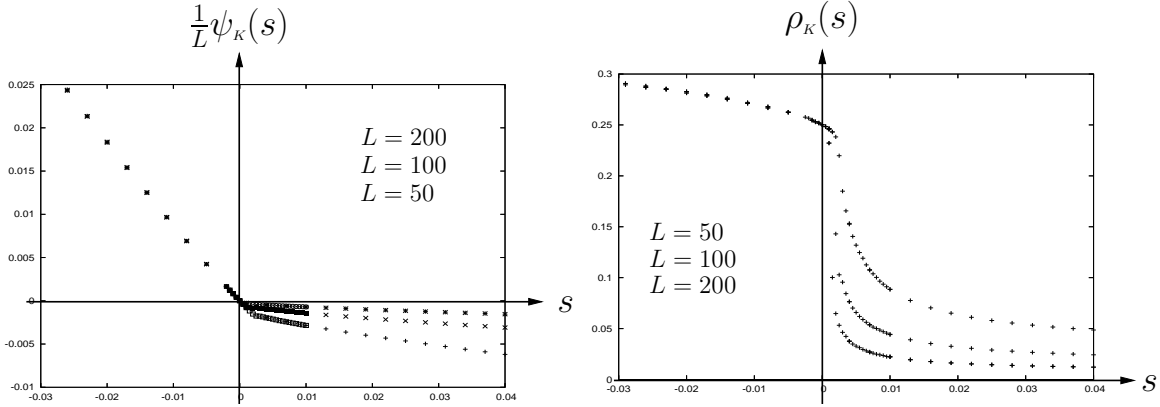


FIG. 4.2 – Comportement de taille finie dans l'état- s associé à K , au voisinage du point singulier $s_c = 0$ pour le modèle FA en dimension 1 ($k = 1$, $k' = 3$, tailles L données dans le même ordre dans la légende que sur les courbes). La branche $s < 0$ (resp. $s > 0$) est plus active (resp. moins active) que l'état stationnaire ($s = 0$). [(a) : gauche] Énergie libre dynamique $\frac{1}{L}\psi_K(s)$. Une transition dynamique du premier ordre a lieu en $s_c = 0$ (de manière effective, $s_c = \mathcal{O}(1/L)$ en taille finie). [(b) : droite] Densité d'excitation $\rho_K(s)$ dans l'état- s . À mesure que L grandit, l'état inactif ($s > 0$) devient de plus en plus inactif.

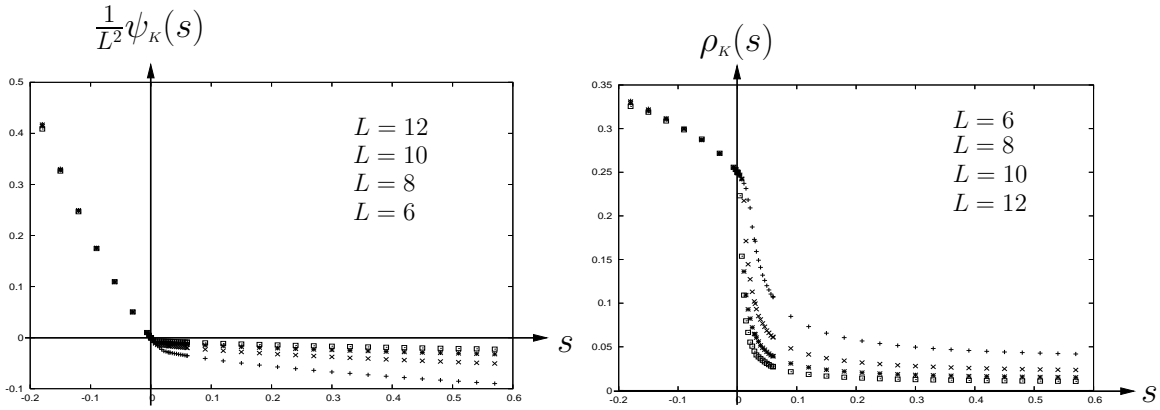


FIG. 4.3 – Comportement de taille finie dans l'état- s associé à K , au voisinage du point singulier $s_c = 0$ pour le modèle FA en dimension 2 ($k = 1$, $k' = 3$, $C_i = f_i$, tailles linéaires L données dans le même ordre dans la légende que sur les courbes). Le système possède L^2 sites. La branche $s < 0$ (resp. $s > 0$) est plus active (resp. moins active) que l'état stationnaire ($s = 0$). [(a) : gauche] Énergie libre dynamique $\frac{1}{L^2}\psi_K(s)$. Une transition dynamique du premier ordre a lieu en $s_c = 0$ (de manière effective, $s_c = \mathcal{O}(1/L^2)$ en taille finie). [(b) : droite] Densité d'excitation $\rho_K(s)$ dans l'état- s . À mesure que L grandit, l'état inactif ($s > 0$) devient de plus en plus inactif.

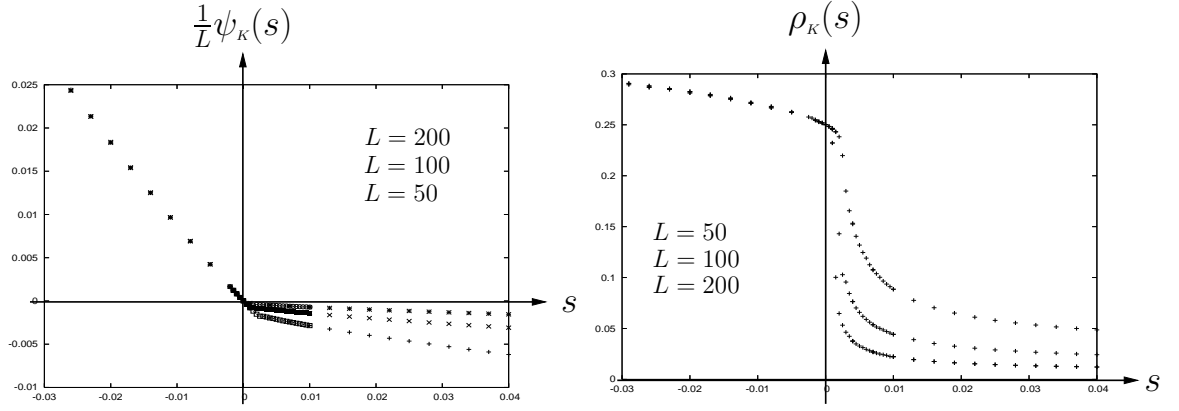


FIG. 4.4 – Comportement de taille finie dans l'état- s associé à K , au voisinage du point singulier $s_c = 0$ pour le modèle East en dimension 1 ($k = 1$, $k' = 3$, tailles L données dans le même ordre dans la légende que sur les courbes). Les graphes et l'interprétation sont similaires à ceux de la figure 4.2.

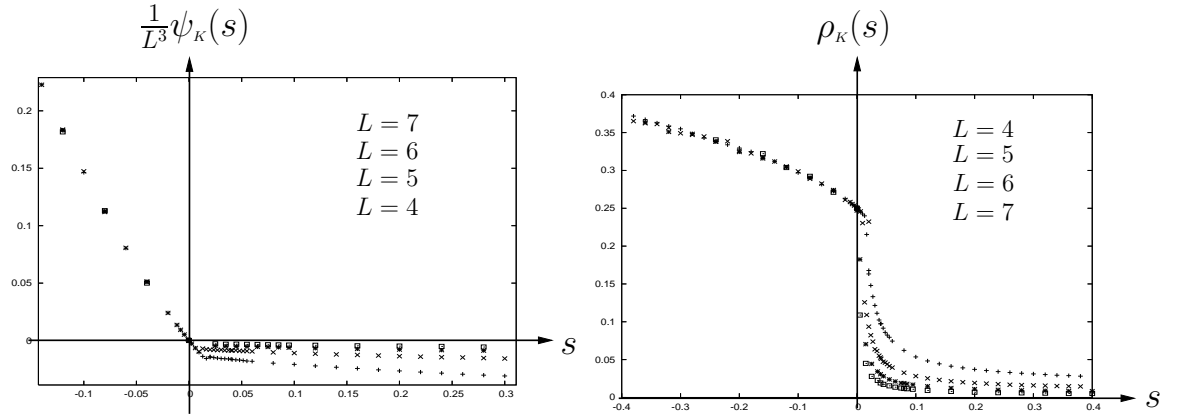


FIG. 4.5 – Comportement de taille finie dans l'état- s associé à K , au voisinage du point singulier $s_c = 0$ pour le modèle East en dimension 3 ($k = 1$, $k' = 3$, tailles linéaires L données dans le même ordre dans la légende que sur les courbes). Le volume du système est $V = L^3$. Les graphes et l'interprétation sont similaires à ceux de la figure 4.2.

P^{eq} . Nous avons utilisé l'algorithme proposé au chapitre 3 pour étudier l'état- s associé au nombre d'événements¹ K pour les modèles FA en dimension 1 et 2 (figures 4.2 et 4.3) et East en dimension 1 et 3 (figures 4.4 et 4.5).

Pour tous ces systèmes, les estimations numériques obtenues pour $\psi_K(s)$ et $\rho_K(s)$ (densité d'excitation $\langle n_i \rangle_s$ dans l'état- s) appuient le scénario suivant : à la limite thermodynamique ($V \rightarrow \infty$), l'état stationnaire standard ($s = 0$) est critique par rapport à la variable (dynamique) s . En détail :

- (i) l'énergie libre dynamique (divisée par $V = L^d$) $\frac{1}{V}\psi_K(s)$ tend à la limite $V \rightarrow \infty$ vers une fonction singulière en $s_c = 0$,
- (ii) dans la branche $s < 0$, l'activité moyenne $\frac{1}{V_t}\langle K \rangle_s = -\frac{1}{V}\psi'_K(s)$, ainsi que la densité d'excitations $\rho_K(s)$ sont non nulles (phase active),
- (iii) dans la branche $s > 0$, l'activité moyenne $\frac{1}{V_t}\langle K \rangle_s$ et la densité d'excitations $\rho_K(s)$ sont nulles (phase inactive).

On a donc une situation assez analogue à celle du processus de contact en champ nul ($h = 0$) en dimension finie (paragraphe 3.2.3) ou en champ moyen (partie 2.4). Toutefois, cette comparaison n'est valide qu'à la limite thermodynamique. En taille finie, $\rho_K(s)|_{s>0}$ est non nul (d'ordre $1/V$) pour les modèles FA ou East (la phase $s > 0$ est faiblement active), tandis que $\rho_K(s)|_{s>0}$ est nul pour toute taille de système dans le CP en champ nul (dans la phase $s > 0$, le système tombe dans un état absorbant).

Enfin, on vérifie que la dynamique non contrainte (où tout est calculable exactement, car les sites sont indépendants) ne présente pas de transition de phase dynamique : l'énergie libre dynamique $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ et la densité dans l'état- s $\rho_K(s)$ ne possèdent pas de singularité à la limite thermodynamique. (figure 4.6).

4.2.2 Approche en champ moyen

Pour déceler l'origine de cette transition dynamique, on s'intéresse à une version de FA sur un graphe complet, avec des taux de transition du type (4.1, 4.3) et une contrainte cinétique C_i égale au nombre de voisins excités. Sur un graphe complet, tous les sites étant voisins entre eux, les taux s'écrivent

$$\begin{cases} W((n_i = 0) \rightarrow (n_i = 1)) = k n \\ W((n_i = 1) \rightarrow (n_i = 0)) = k' (n - 1) \end{cases} \quad \text{pour } L \rightarrow \infty \quad (4.4)$$

où $n = \sum_i n_i$ est le nombre total d'excitations. À nouveau, ces taux possèdent un état complètement isolé ($n = 0$) dont on ne peut pas sortir et qu'on ne peut pas atteindre. On s'intéresse à la dynamique dans la partie restante de l'espace de configuration ($n > 0$), qui est irréductible. À la limite thermodynamique ($L \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, $\rho = n/L$ fixé), et dans l'espace

¹L'étude de la complexité dynamique Q_+ donne des résultats similaires.

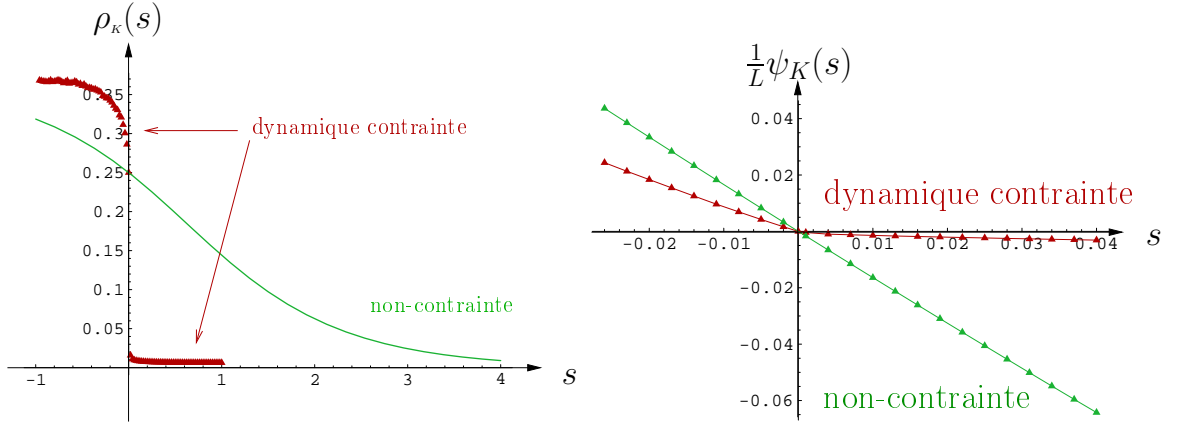


FIG. 4.6 – Comparaison entre les état- s de la dynamique contrainte (en rouge) et de la dynamique non contrainte (en vert) pour un système de taille ($L = 100$, $k = 1$, $k' = 3$).

[(a) : gauche] Densité d'excitation $\rho_K(s)$ sur une large gamme de valeurs de s . La dynamique non contrainte présente une seule phase active, contrairement à la dynamique contrainte.

[(b) : droite] Énergie libre dynamique $\frac{1}{L}\psi_K(s)$ correspondante, autour de $s = 0$.

du nombre total d'excitations (cf. éq. 2.13), les taux se comportent à l'ordre dominant en

$$\begin{cases} W^+(n) = L k \rho^2 \\ W^-(n) = L k' \rho(1 - \rho) \end{cases} \quad \text{pour } L \rightarrow \infty \quad (4.5)$$

et, d'après les résultats du chapitre 3, la fonction de grandes déviations $\psi_K(s)$ est donnée à l'ordre dominant par $\frac{1}{L}\psi_K(s) = -\min_{\rho} \mathcal{F}_K(\rho, s)$ avec l'énergie libre dynamique à la Landau

$$\mathcal{F}_K(\rho, s) = k \rho^2 + k' \rho(1 - \rho) - 2e^{-s} \rho [k k' \rho(1 - \rho)]^{1/2} \quad (4.6)$$

Une analyse immédiate montre qu'à la limite thermodynamique le système possède une transition de phase (figure 4.7) similaire à celle observée numériquement en dimension 1 et 2.

L'interprétation (2.27) de l'énergie libre à la Landau-Ginzburg justifie l'image heuristique de coexistence de phase dynamique proposée dans [76] (cf. également la figure 4.9).

Notons qu'en l'absence de contrainte,

$$\begin{cases} W^+(n) = L k \rho \\ W^-(n) = L k' (1 - \rho) \end{cases} \quad \text{pour } L \rightarrow \infty \quad (4.7)$$

on a à l'ordre dominant $\frac{1}{L}\psi_K(s) = -\min_{\rho} \mathcal{F}_K(\rho, s)$ avec

$$\mathcal{F}_K(\rho, s) = k \rho + k' (1 - \rho) - 2e^{-s} [k k' \rho(1 - \rho)]^{1/2} \quad (\text{cas non contraint}) \quad (4.8)$$

Enfin, on peut voir que le point critique (de température nulle) de FA ne joue pas de rôle vis-à-vis de la transition de phase dynamique. Le modèle $A + A \leftrightarrow 0$ possède les mêmes propriétés critiques que le modèle FA [77] au voisinage de la température nulle, mais on peut

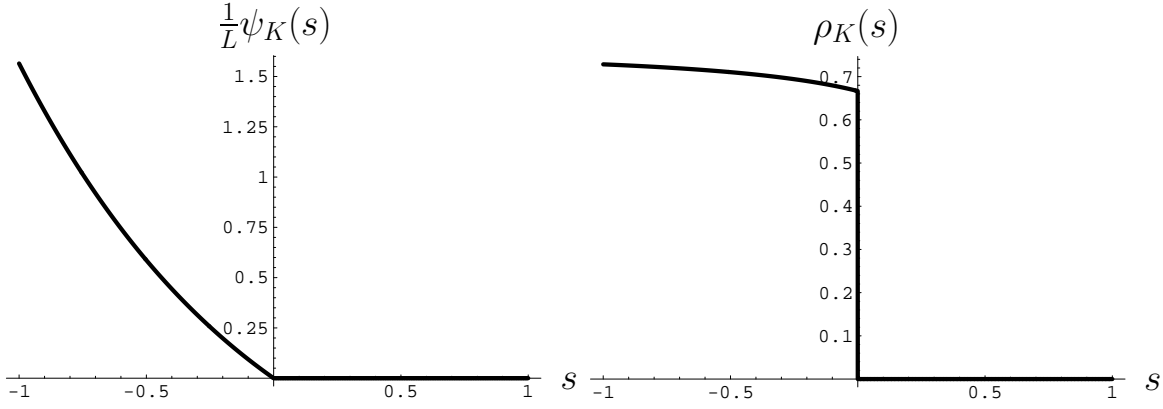


FIG. 4.7 – État- s du modèle FA en champ moyen (taux définis en (4.4)) pour $k = 1, k' = 2$. Les résultats correspondent à ceux du modèle FA en dimension 1 et 2 (figures 4.3 et 4.3) à la limite thermodynamique. [(a) : gauche] Énergie libre dynamique $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L}\psi_K(s)$ correspondante. [(b) : droite] Densité d'excitation $\rho_K(s)$.

voir que son énergie libre dynamique, au moins en champ moyen, n'est pas singulière. Les taux de transition des processus $0 \rightarrow A + A$ et $A + A \rightarrow 0$ s'écrivent dans l'espace du nombre total de particules n :

$$\begin{cases} W(n \rightarrow n-2) = k n(n-1) \\ W(n \rightarrow n+2) = k' (L-n)(L-n+1) \end{cases} \quad \text{pour } L \rightarrow \infty \quad (4.9)$$

et grâce aux résultats du chapitre 3 on constate facilement que l'énergie libre dynamique de Landau $\mathcal{F}_K(\rho, s)$ est purement quadratique en la densité ρ . Le modèle n'est donc pas dynamiquement critique². Ces résultats se transposent également en dimension finie.

²On vérifie également que $\mathcal{F}_+(\rho, s)$ ne possède qu'un minimum pour tout s .

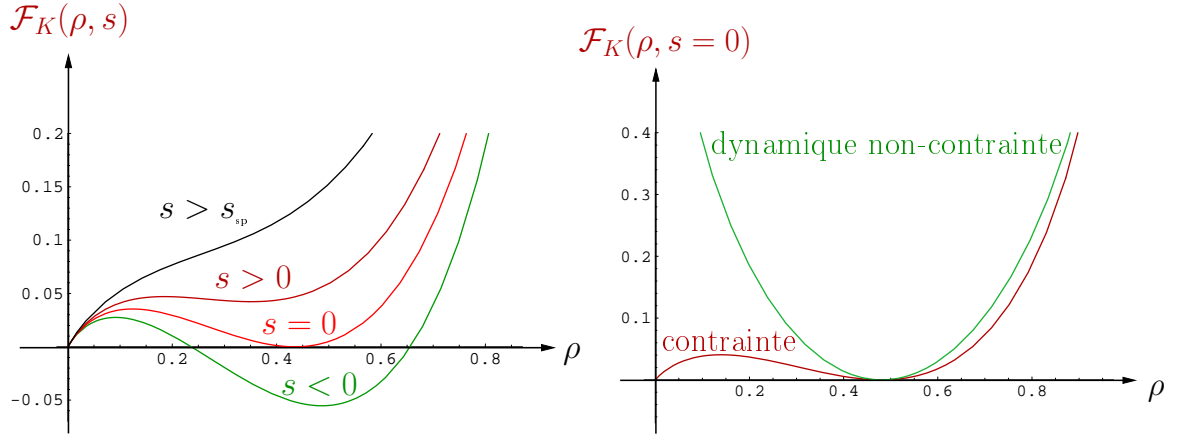


FIG. 4.8 – Énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}_K(\rho, s)$ pour le modèle FA sur un graphe complet, à la limite thermodynamique. [(a) : gauche] Pour différentes valeurs de s . [(b) : droite] Pour $s = 0$: comparaison à la dynamique non contrainte (taux définis en 4.7).

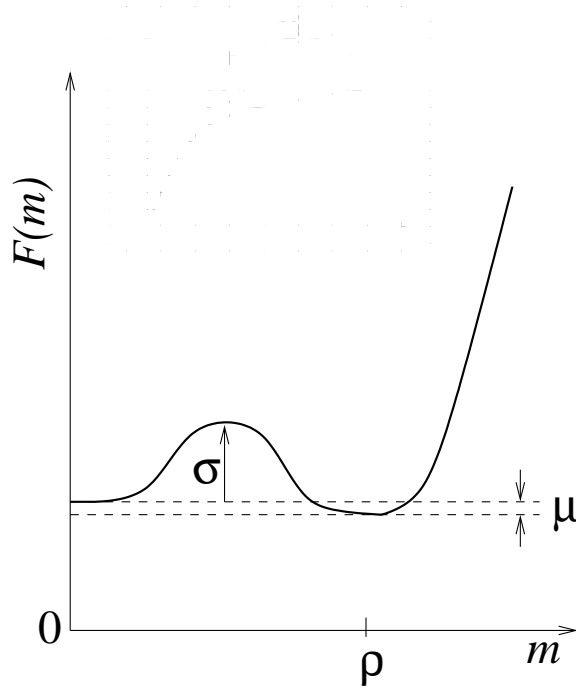


FIG. 4.9 – Énergie libre phénoménologique proposée dans [76] pour rendre compte de la coexistence de phase. Pour le modèle FA en champ moyen étudié dans ce paragraphe il est possible de construire exactement cette quantité (figure 4.8) : il s'agit de $\mathcal{F}(\rho, s = 0)$. Dans notre approche, la quantité μ (différence d'énergie libre entre la phase active et la phase inactive) est d'ordre $1/L$.

Deuxième partie

Fluctuations de courant

Chapitre 5

Introduction aux grandes déviations de courant

Dans ce chapitre, nous donnons un aperçu des résultats existant dans la littérature autour des fonctions de grandes déviations du courant.

5.1 Irréversibilité

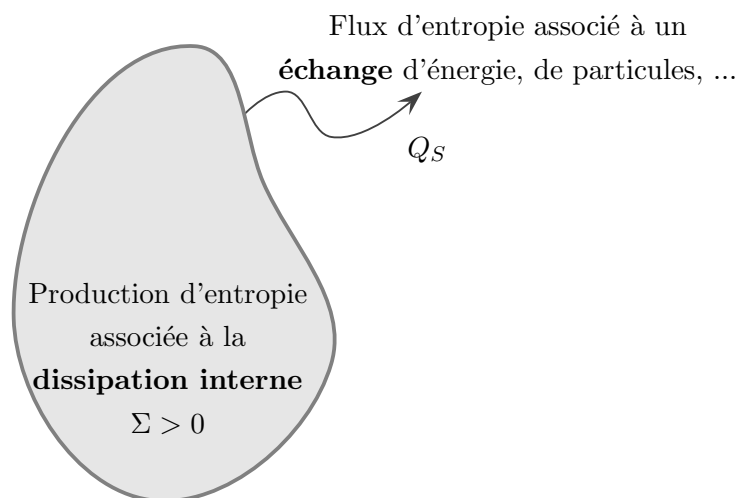


FIG. 5.1 – Production et flux d'entropie moyens dans un système dissipatif

La second principe de la thermodynamique énonce que l'entropie d'un système isolé ne peut qu'augmenter au cours du temps, ou, plus généralement, que la variation d'entropie ΔS d'un système au cours d'une évolution est la somme de deux contributions (figure 5.1) :

$$\Delta S = \Sigma - Q_S \quad (5.1)$$

Cette relation est la version intégrée du bilan d'entropie

$$\frac{dS}{dt} = \int_{\text{volume}} dV \sigma_{\text{irr}} - \int_{\text{surface}} d\vec{S} \cdot \vec{J}_S \quad (5.2)$$

L'entropie échangée Q_S est liée aux courants d'énergie, de charges, de particules, etc... entre le système et l'environnement. L'entropie produite Σ est positive et correspond aux phénomènes irréversibles qui se déroulent à l'intérieur du système. Dans l'état stationnaire ($\Delta S = 0$), l'entropie échangée ($Q_S = \Sigma$) est positive.

L'existence d'une quantité comme Σ , positive pour toute évolution temporelle, permet de caractériser les systèmes qui ont une dynamique réversible. Comparons les variations d'entropie d'une évolution donnée ($\Delta S = \Sigma - Q_S$) et de son évolution renversée temporellement ($\Delta S^R = \Sigma^R - Q_S^R$). Comme $\Delta S = -\Delta S^R$, la dynamique est réversible ($Q^R = -Q$) seulement si $\Sigma^R = -\Sigma$, ce qui implique $\Sigma = 0$. D'où le résultat suivant : les évolutions réversibles sont celles dont la production d'entropie est nulle.

Ce point de vue est celui de la thermodynamique macroscopique. En physique statistique, l'entropie échangée est une quantité fluctuante et n'est positive qu'en moyenne dans l'état stationnaire. Les relations de fluctuations généralisent le résultat ci-dessus. Ce sont des identités qui apparaissent lors de la comparaison, à l'échelle microscopique, des histoires directes et renversées dans le temps suivies par un système.

5.2 Relations de fluctuation : galerie de portraits

5.2.1 Systèmes déterministes

L'observation, par Evans, Cohen et Morriss [50], d'une relation simple entre la probabilité de mesurer une certaine contrainte de cisaillement σ et la probabilité de mesurer la contrainte opposée $-\sigma$ dans un fluide hors d'équilibre, sur une durée d'observation t

$$\frac{\text{Prob}[\sigma]}{\text{Prob}[-\sigma]} \sim e^{t\sigma} \quad (5.3)$$

a été le point de départ d'une série d'analyses, de généralisations, ou de traductions dans d'autres contextes de cette relation, l'idée centrale étant toujours la comparaison entre les histoires d'un système et de leur renversé temporel. Dans le cadre des systèmes dynamiques Evans et Searles [51, 52], Gallavotti et Cohen [58, 59] ont étudié ce genre de relation en s'appuyant sur une analyse précise de la mesure dans un état hors d'équilibre à temps fini t , définition problématique à la limite $t \rightarrow \infty$ (voir le point de vue récent de Kurchan [91] pour une analyse très claire). Dans de telles approches, la quantité σ représente plus généralement l'entropie (fluctuante) échangée par le système avec l'environnement. Dans tous les cas, la relation (5.3) donne une mesure de la difficulté à observer des déviations ($\text{Prob}[-\sigma] \sim \text{Prob}[\sigma]e^{-t\sigma}$) de l'égalité $\langle \sigma \rangle > 0$, valable en moyenne. Remarquons enfin que (5.3) implique également

$$\langle e^{-st\sigma} \rangle \sim \langle e^{-(1-s)t\sigma} \rangle \quad (5.4)$$

5.2.2 Systèmes stochastiques décrits par une équation de Langevin

Dans le cas de particules dont le mouvement obéit à une équation de Langevin, Kurchan [90] a montré que le travail des forces non conservatives agissant sur le système vérifie une relation du type (5.4) – premier exemple d’un théorème de fluctuation dans un cadre stochastique. Dans ce cadre, la démonstration du résultat n’est pas éclipsée par les difficultés techniques de la définition de la mesure dans les systèmes dynamiques.

Comme exemple pédagogique, on peut considérer un ensemble de particules en contact avec un bain thermique de température unité, placées dans un champ E . Pour varier les plaisirs, on choisit d’utiliser un formalisme de théorie de champ, différent du point de vue de [90], mais tout à fait équivalent. La densité $\rho(x, t)$ des particules obéit elle-même à une équation de Langevin (dans la discrétisation de Itô [29]) :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla j &= 0 \\ j &= -D \nabla \rho + E \rho + \eta \\ \langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle &= 2D \delta^{(d)}(x - x') \delta(t - t') \rho(x, t)\end{aligned}\tag{5.5}$$

On s’intéresse aux grandes déviations du courant intégré $Q = \int dt dx j(x, t)$ et au comportement aux grands temps de la fonction de partition $Z_Q(s, t) = \langle e^{-sQ} \rangle$. À partir des équations (5.5), on détermine l’action $S[\rho, \bar{\rho}; s]$ telle que $Z_Q(s, t) = \int \mathcal{D}\rho \mathcal{D}\bar{\rho} e^{-S[\rho, \bar{\rho}; s]}$, suivant les méthodes standard de passage d’une équation de Langevin à une théorie de champ [6, 41, 79, 80] (cf. également le paragraphe 8.2.1). On obtient presque sans calcul :

$$S[\rho, \bar{\rho}; s] = \int dt dx \left\{ \bar{\rho} [\partial_t - D \Delta + (E - 2sD) \nabla] \rho - D (\nabla \bar{\rho})^2 \rho + s(E - Ds) \rho \right\} \tag{5.6}$$

On vérifie facilement que l’action $S[\rho, \bar{\rho}; s]$ est invariante (à des termes de bord non extensifs en temps près) sous les transformations

$$\begin{cases} t \mapsto -t \\ \bar{\rho} \mapsto -\bar{\rho} + \log \frac{\rho}{\rho_0} \\ s \mapsto \frac{E}{D} - s \end{cases} \tag{5.7}$$

Ce qui montre que l’énergie libre dynamique $\psi_Q(s) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln Z_Q(s, t)$ vérifie la symétrie

$$\psi_Q(s) = \psi_Q(E/D - s) \tag{5.8}$$

qui n’est autre qu’une forme du théorème de fluctuation. Alternativement, on peut utiliser l’invariance sous la symétrie

$$\begin{cases} t \mapsto -t \\ \bar{\rho} \mapsto \bar{\rho} + f \\ s \mapsto \frac{E}{D} - s \end{cases} \tag{5.9}$$

où la fonction f est solution de

$$\partial_t \rho + (E - 2sD)\nabla \rho - D\nabla(\rho \nabla f) = 0 \quad (5.10)$$

et s'interprète (*cf.* éq. 5.5) comme la partie longitudinale du courant dans l'état- s . À l'équilibre ($E = 0$), les symétries (5.7) et (5.9) sont des symétries par renversement du temps dont on peut par exemple déduire la relation de fluctuation dissipation d'Einstein (on consultera [3] pour une étude systématique).

5.2.3 Processus de Markov

En suivant [64, 93, 96], on définit pour un système markovien en temps continu le courant d'entropie Q_S :

$$Q_S = \sum_{k=0}^{K-1} \ln \frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{W(\mathcal{C}_{k+1} \rightarrow \mathcal{C}_k)} \quad (5.11)$$

pour une histoire de configurations $(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K)$. On a déjà vu que la variation de l'entropie de Boltzmann-Gibbs (1.101) s'écrit

$$\Delta S \equiv S(t) - S(0) = \Sigma(t) - \langle Q_S \rangle \quad (5.12)$$

où $\Sigma(t) = \int_0^t dt \sigma_{\text{irr}}$ et $\sigma_{\text{irr}} > 0$ est défini en (1.103). On retrouve exactement la situation décrite au paragraphe 5.1, mais cette fois les observables sont fluctuantes : Q_S défini par (5.11) a le sens d'un courant d'entropie entre le système et l'environnement. Sur la plupart des exemples physiques, il s'écrit justement comme la somme de courants d'énergie ou de particules pondérés par les affinités conjuguée (*cf.* la partie 6.2.2 pour un exemple). C'est aussi la grandeur qui vérifie le théorème de fluctuation. En effet, d'après (1.60), l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_S associé à Q_S a pour éléments

$$(\mathbb{W}_S)_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')^{1-s} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')^s - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \quad (5.13)$$

et vérifie

$$\mathbb{W}_S(1-s) = \mathbb{W}_S(s)^\dagger \quad (5.14)$$

L'énergie libre dynamique $\psi_S(s)$ associée à Q_S vérifie donc la relation de fluctuation

$$\psi_S(1-s) = \psi_S(s) \quad (5.15)$$

5.2.4 Relations apparentées et applications

Enfin, Jarzynski [82] puis Crooks [26, 27] ont obtenu des relations apparentées au théorème de fluctuation. Considérons un système physique décrit par un hamiltonien H_λ qui dépend d'un paramètre de contrôle λ (représentant par exemple la distance, fixée, entre deux éléments du système). La relation de Jarzynski donne un lien entre

- (i) la différence d'énergie libre $\Delta F \equiv F(\lambda_f) - F(\lambda_i)$ entre les états d'équilibre à λ_f et λ_i ,

- (ii) le travail (fluctuant) exercé par l'opérateur W sur le système pour faire varier le paramètre extérieur de λ_i à λ_f , *même pour les évolutions qui ne sont pas quasi-statiques* (l'état final à λ_2 n'a pas besoin d'être revenu à l'équilibre)

sous la forme

$$e^{-\beta\Delta F} = \langle e^{-\beta W} \rangle \quad (5.16)$$

La relation de Crooks concerne quant à elle directement les distributions de probabilités $P_F(W)$ et $P_R(W)$ du travail pour deux processus direct et renversé en temps :

$$\frac{P_F(W)}{P_R(-W)} = e^{\beta(W-\Delta F)} \quad (5.17)$$

La relation de Jarzynski s'obtient comme cas particulier de (5.17). Dans le cadre des systèmes markoviens, on peut effectuer un lien direct entre le théorème de fluctuation et les relations précédentes [27, 110]. On considère une dynamique de taux $W\lambda(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ vérifiant le bilan détaillé par rapport à une loi d'équilibre $e^{-\beta E_\lambda}/Z_\lambda$ où $E_\lambda(\mathcal{C}) = E(\mathcal{C}) - \lambda X(\mathcal{C})$, λ et $X(\mathcal{C})$ étant thermodynamiquement conjuguée. En utilisant la décomposition [28]

$$E_f - E_i = \underbrace{\sum_{k=0}^K [E_{\lambda_k}(\mathcal{C}_{k+1}) - E_{\lambda_k}(\mathcal{C}_{k+1})]}_{\equiv Q} - \underbrace{\sum_{k=0}^K A(\mathcal{C}_k)(\lambda_{k+1} - \lambda_k)}_{\equiv W} \quad (5.18)$$

la définition de l'énergie libre $-\beta F = \ln Z$ donne bien (5.17) pour un état initial d'équilibre.

Les expériences qui concernent le théorème de fluctuation couvrent un grand nombre de domaines, allant des billes en mouvement dans un piège optique [130] aux écoulements turbulents [24, 25] en passant par les circuits électroniques [60]. Une des applications les plus intéressantes concerne probablement l'utilisation des relations de Jarzynski-Crooks pour déterminer des différences d'énergie libre de conformation de molécules uniques. Notons que l'on peut également tenir compte des différences d'énergie libre dues aux réactions chimiques [66]. On consultera [22] pour une introduction, [110] pour une revue exhaustive, notamment des utilisations des relations de Jarzynski-Crooks en biophysique.

5.3 Principe d'additivité

Nous détaillons ici une situation assez remarquable où la fonction de grandes déviations du courant est calculable exactement pour toute valeur de s . Il sera possible d'en déduire les situations où il ne s'applique pas. Bodineau et Derrida [18, 19, 20] ont montré que l'on peut énoncer, pour les systèmes diffusifs en contact avec deux réservoirs de particules, un "principe d'additivité" qui donne la fonction $\psi_Q(s)$ associée au courant Q traversant le système à une de ses extrémités. L'exposé de ces résultats nous permettra également de mettre en perspective le principe variationnel obtenu – pour les situations en champ moyen – au chapitre 2. Bertini *et al.* [14] ont montré que ce principe découlait de l'hydrodynamique fluctuante.

5.3.1 Notations

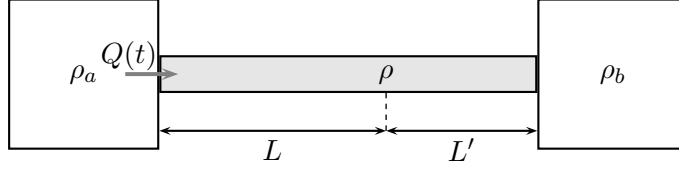


FIG. 5.2 – Système en contact avec deux réservoirs de particules

On s'intéresse ici à un système de particules en interaction sur un réseau, en contact avec deux réservoirs de densités ρ_a et ρ_b (figure 5.2). On note $Q(t)$ le courant ayant traversé une extrémité du système entre 0 et t , et $\psi(s, L) = \psi_Q(s)$ la fonction associée, pour un système de longueur L . La connaissance de $\psi(s, L)$ détermine pour les temps longs la fonction de grandes déviations $\pi_L(q)$ définie par :

$$\text{Prob} \left(\frac{Q(t)}{t} = q, L \right) = \exp(t \pi_L(q)) . \quad (5.19)$$

π est la transformée de Legendre de ψ : $\psi(s, L) = \max_q \left(-sq + \pi_L(q) \right)$, et donc :

$$\begin{cases} \pi_L(q) = \psi(s, L) + sq \\ q = \frac{d\pi_L}{ds} . \end{cases} \quad (5.20)$$

5.3.2 Principe d'additivité

Considérons un système de longueur $L + L'$ en contact avec deux réservoirs, séparé artificiellement en deux parties de longueurs L et L' (figure 5.2), et notons ρ la densité au point de séparation. Bodineau et Derrida ont postulé [18] que la distribution de probabilité du courant q dans le système entier est égale au maximum sur ρ de la distribution de probabilité du courant dans chacune des deux parties, supposées indépendantes, et traversées par le même courant q :

$$\text{Prob}(q, \rho_a, \rho_b; L + L') \sim \max_{\rho} \left\{ \text{Prob}(q, \rho_a, \rho; L) \text{Prob}(q, \rho, \rho_b; L') \right\} . \quad (5.21)$$

Autrement dit, pour la fonction de grandes déviations :

$$\pi_{L+L'}(q, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho} \left(\pi_L(q, \rho_a, \rho) + \pi_{L'}(q, \rho, \rho_b) \right) . \quad (5.22)$$

Nous allons rappeler comment ce principe permet, de manière générale, de trouver la distribution du courant moyen dans le système en régime stationnaire (ρ_a et ρ_b quelconques), à partir de ses deux premiers cumulants près de l'équilibre ($\rho_a \simeq \rho_b$).

5.3.3 Distribution du courant

Lorsque les densités des deux réservoirs sont presque égales, *i.e.* $\rho_b = \rho$ et $\rho_a = \rho + \Delta\rho$, avec $\Delta\rho \ll \rho$, on suppose que le système est traversé par un faible courant, dont la forme est donnée par la loi de Fick (approximation linéaire) :

$$\frac{\langle Q \rangle}{t} = \frac{D(\rho)}{L} \Delta\rho \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho_a = \rho + \Delta\rho \\ \rho_b = \rho, \end{cases} \quad (5.23)$$

ce qui définit un coefficient de diffusion effectif $D(\rho)$, premier moment de la distribution du courant moyen *près de l'équilibre*, à la densité ρ .

Lorsque $\rho_a = \rho_b = \rho$, le système, dans le régime stationnaire, est à l'équilibre, et la valeur moyenne du courant qui le traverse est nulle. En revanche, comme on l'a vu sur des exemples dans le chapitre 3, ses fluctuations sont en général non nulles. On suppose que ces fluctuations sont de l'ordre de $1/L$. Ceci définit une fonction $\sigma(\rho)$ telle que

$$\frac{\langle Q^2 \rangle}{t} = \frac{\sigma(\rho)}{L}, \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho_a = \rho \\ \rho_b = \rho. \end{cases} \quad (5.24)$$

Dans l'exemple du processus d'exclusion symétrique, les deux fonctions précédentes sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho). \end{cases} \quad (5.25)$$

Nous allons voir qu'en appliquant le principe d'additivité, tous les cumulants de $Q(t)$ dans le régime stationnaire peuvent être exprimés grâce aux fonctions D et σ . Appliquons le principe d'additivité au système, après l'avoir découpé (figure 5.3) en sous-systèmes de taille ℓ :

- assez petite pour que $\Delta\rho_i = \rho_i - \rho_{i+1}$ soit faible, *i.e.* que chaque sous-système soit proche de l'équilibre,
- et assez grande pour que les fluctuations soient d'ordre $1/\ell$ et que (5.24) soit valable pour les sous-systèmes successifs de taille ℓ .

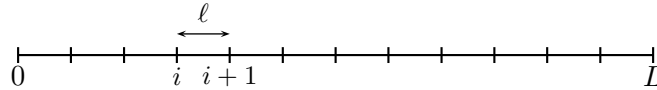


FIG. 5.3 – Découpage du système en éléments de taille ℓ

Si ρ_i désigne la densité au site i , alors, le principe d'additivité s'écrit :

$$\pi_L(q, \rho_a, \rho_b) = \max_{\{\rho_i\}} \sum_{i=1}^{L/\ell} \pi_\ell(q, \rho_i, \rho_{i+1}). \quad (5.26)$$

D'après (5.19), $\pi_\ell(q, \rho_i, \rho_{i+1})$ prend son maximum en $q = \frac{1}{\ell} \langle Q(t) \rangle$, et a pour variance $\frac{1}{\ell} \langle Q^2(t) \rangle_c$. Comme chaque sous-système de taille ℓ est proche de l'équilibre, on peut approximer π quadratiquement (ce qui revient à faire une approximation gaussienne pour la distribution de probabilité), et donc écrire :

$$\pi_\ell(q, \rho_i, \rho_{i+1}) = - \frac{\left(q - \frac{1}{\ell} \langle Q(t) \rangle\right)^2}{2 \frac{1}{\ell} \langle Q^2(t) \rangle_c}. \quad (5.27)$$

Ainsi, en revenant aux définitions des fonctions $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$:

$$\pi_\ell(q, \rho_i, \rho_{i+1}) = - \frac{\left(q - \frac{\rho_i - \rho_{i+1}}{\ell} D(\rho_i)\right)^2}{2 \frac{\sigma(\rho_i)}{\ell}}. \quad (5.28)$$

En supposant que les fonctions sont assez régulières pour pouvoir passer à la limite continue, et en posant $x_i = i\ell/L$, on a :

$$\pi_L(q, \rho_a, \rho_b) = \max_{\{\rho(x_i)\}} \left(- \sum_i \frac{\left(qL + \rho'(x_i) D(\rho(x_i))\right)^2 \frac{\ell}{L}}{2\sigma(\rho(x_i))} \right), \quad (5.29)$$

où l'on a utilisé la définition $\rho_i = \rho(x_i)$ et le développement $\rho_{i+1} = \rho(x_i + \ell/L) = \rho_i + \frac{\ell}{L} \rho'(x_i)$. Enfin, en faisant tendre ℓ/L tend vers 0, on obtient :

$$\pi_L(q, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho(x)} \left(- \int_0^1 \frac{\left(qL + \rho'(x) D(\rho(x))\right)^2}{2\sigma(\rho(x))} dx \right). \quad (5.30)$$

Ce résultat est celui qui permet de faire le lien avec l'hydrodynamique fluctuante, comme analysé par Bertini *et al.* [14] (cf. également l'annexe A de [19] où l'éq. 5.30 est obtenue assez simplement). L'approche est également équivalente à celle développée dans [84, 107]. On peut déduire de (5.30) un résultat similaire pour $\psi(s, L)$ [19] :

$$\psi(s, \rho_a, \rho_b; L) = - \min_{\rho(x)} \left\{ sq + \int_0^1 \frac{\left(qL + \rho'(x) D(\rho(x))\right)^2}{2\sigma(\rho(x))} dx \right\} \quad (5.31)$$

Ce résultat est analogue au principe variationnel (2.25 2.26) obtenu au chapitre 2 en champ moyen, pour une quantité A quelconque. Le profil de densité optimal qui extrémalise (5.31) correspond à la densité moyenne $\rho_A(s)$ dans l'état- s définie en champ moyen. Précisons que la relation (5.31) n'est pas tout à fait générale et qu'il faut en principe autoriser des profils de densité $\rho(x, t)$ non stationnaires (cf. [14, 19, 20] pour des exemples).

Nous pouvons désormais identifier plusieurs situations où l'approche précédente n'est pas utilisable.

- (i) Si le courant étudié Q ne se comporte pas en $1/L$ comme dans (5.23), les lois d'échelle correspondantes pour $\pi_L(q)$ ne permettent pas de découper le système en sous-systèmes proches de l'équilibre et l'approche de l'additivité est mise en défaut. Nous étudions une telle situation au chapitre 6.

- (ii) Il existe des situations où, suivant les configurations explorées par le système, les fluctuations du courant adoptent plusieurs régimes différents en fonction de la taille L du système. Nous examinons en détail le cas du SEP au chapitre 7, pour lequel nous montrons que l'approche de l'additivité n'est valide que dans un certain régime de s .
- (iii) Enfin, l'hydrodynamique fluctuante, qui permet de retrouver le principe d'additivité, n'est valide que pour les systèmes diffusifs. Nous examinons au chapitre 8 le comportement de $\psi_Q(s)$ à la limite macroscopique dans des exemples de systèmes superdiffusifs.

Chapitre 6

Système de spin en contact avec deux bains thermiques

6.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons le système étudié dans la publication **P1** avant de donner les grandes lignes des résultats obtenus et de détailler certains points à la lumière du chapitre 2. Les résultats ont été obtenus en collaboration avec Frédéric van Wijland et Zoltán Rácz.

6.1.1 Motivations

Dans les systèmes diffusifs, Bodineau et Derrida [18, 19, 20] ont montré que la connaissance des coefficients de diffusion D et σ permet de reconstruire entièrement la fonction génératrice $\psi_Q(s)$ associée au courant qui traverse le système. Ce résultat est valide pour les systèmes faiblement hors d'équilibre (le courant qui les traverse tend vers 0 avec la taille du système). Nous nous intéressons dans ce chapitre au courant d'énergie Q traversant un système de spins en contact avec deux bains de température différents, le menant loin de l'équilibre (le courant ne tendant pas vers 0 avec la taille du système).

Le système présente également une transition de phase thermodynamique, accompagnée d'une brisure de la symétrie par renversement des spins, dont on peut étudier les effets sur les fluctuations de courant.

6.1.2 Système de spins

Nous repartons du système de spins d'Ising défini au paragraphe 2.1.1, dont l'énergie totale H est donnée en (2.1). Les spins sont séparés en deux groupes 1 et 2 de tailles égales ($N/2$), chacun thermalisé à la température β_ν ($\nu = 1$ ou 2), c'est-à-dire soumis à des taux de transition de type Glauber

$$W_\nu(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i) = e^{-\beta_\nu \sigma_i \frac{M}{N}} \quad \text{si } i \in \nu \quad (6.1)$$

qui dépendent du groupe ν auquel le spin retourné appartient. Comme dans (2.3), M représente l'aimantation totale du système avant le retournement de σ_i . Ce type de contact thermique, où chaque spin essaye de s'équilibrer à une température donnée – qui n'est pas forcément la même dans tout le système – est la traduction sur un graphe complet des systèmes unidimensionnels étudiés par Rácz et Zia [108], puis par Schmittmann et Schmüser [117]. Dans la suite, on utilisera les notations

$$\beta = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2}, \quad \varepsilon = \frac{\beta_1 - \beta_2}{2} \quad (6.2)$$

(ε n'est pas supposé infinitésimal). Si les deux bains ont même température ($\varepsilon = 0$), le système atteint un état d'équilibre donné par le poids de Boltzmann $P^{\text{eq}} \propto e^{-\beta H}$, comme dans la partie 2.2. Dans le cas contraire, le système atteint un état stationnaire hors d'équilibre, dont nous allons étudier les propriétés.

6.2 État stationnaire

6.2.1 Diagramme de phase

Les aimantations moyennes de chaque sous-système s'écrivent

$$m_1 = \frac{1}{N} \langle \sum_{j \in 1} \sigma_j \rangle, \quad m_2 = \frac{1}{N} \langle \sum_{j \in 2} \sigma_j \rangle, \quad m = \frac{M}{N} = m_1 + m_2 \quad (6.3)$$

et vérifient (le champ moyen étant exact dans la limite $N \rightarrow \infty$)

$$\frac{dm_1}{dt} = -2m_1 \cosh \beta_1 m + \sinh \beta_1 m, \quad \frac{dm_2}{dt} = -2m_2 \cosh \beta_2 m + \sinh \beta_2 m \quad (6.4)$$

Ainsi, dans l'état stationnaire, l'aimantation totale du système est solution de

$$m = \frac{1}{2} (\tanh \beta_1 m + \tanh \beta_2 m) \quad (6.5)$$

Pour $\varepsilon = 0$, on retrouve l'équation de champ moyen d'équilibre (2.64). On déduit de (6.5) que, dans l'état stationnaire, le système présente une transition de phase du second ordre, qui sépare une phase désordonnée ($m_1 = m_2 = m = 0$) en haute température ($\beta < 1$) d'une phase désordonnée (doublement dégénérée) en basse température. L'aimantation totale est déterminée par (6.5), ce qui fixe

$$m_\nu = \frac{1}{2} \tanh \beta_\nu m \quad (6.6)$$

d'après (6.4).

6.2.2 Courant d'entropie, courant d'énergie

On voit immédiatement que le courant d'entropie traversant le système – défini assez abstraitement à l'équation (1.99) – est relié de manière directe au courant d'énergie traversant le système. D'après l'expression (6.1) des taux de transition, on obtient en effet

$$Q_S(t) = -\beta(H[\sigma(t)] - H[\sigma(0)]) + \varepsilon Q(t) \quad (6.7)$$

où la quantité Q

$$Q(t) = -\frac{2}{N} \sum_{k=0}^K (\pm) \sigma_{j_k} (M_k - \sigma_{j_k}) , \quad (6.8)$$

somme des variations d'énergie ΔH à chaque retournement de spin, représente le courant total traversant le système pour une histoire donnée (σ_{j_k} est le $k^{\text{ème}}$ spin retourné au cours du temps et M_k est l'aimantation totale avant ce retournement). Le signe + (resp. -) correspond au retournement d'un spin du groupe 1 (resp. 2). Comme $H[\boldsymbol{\sigma}(t)] - H[\boldsymbol{\sigma}(0)]$ est borné au cours du temps, $Q_S(t)$ et $\varepsilon Q(t)$ possèdent la même fonction de grandes déviations $\psi_{Q_S}(s)$. La même interprétation a lieu au niveau des valeurs moyennes : en notant J_ν le flux d'énergie dû au retournement des spins du groupe ν

$$J_\nu = -\frac{2}{N} \left\langle \sum_{j \in \nu} \sigma_j (M - \sigma_j) e^{-\beta_\nu \sigma_j M/N} \right\rangle \quad (6.9)$$

on voit directement que le flux d'énergie qui traverse le système $J \equiv \frac{\langle Q(t) \rangle}{t}$ vaut

$$J = J_1 - J_2 \quad (6.10)$$

Dans l'état stationnaire, on a $\frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 = -(J_1 + J_2)$ et les flux J_1 et J_2 sont opposés. Le flux d'entropie $J_S \equiv \frac{\langle Q_S(t) \rangle}{t}$ vaut

$$J_S = \beta_1 J_1 + \beta_2 J_2 = \varepsilon J \quad (6.11)$$

et on retrouve l'expression habituelle du courant l'entropie dans la théorie d'Onsager [102, 103, 23].

6.2.3 État stationnaire hors d'équilibre

Comme au chapitre 2, nous étudions l'évolution du système dans l'espace des aimantations totales $M_\nu = \sum_{j \in \nu} \sigma_j$ dans chaque groupe de spin ν . À la limite thermodynamique, la distribution stationnaire $P(M_1, M_2)$ dans l'espace des M_ν peut être déterminée à l'échelle des fluctuations d'aimantation

$$x_\nu = \frac{M_\nu - N m_\nu}{\sqrt{N}}, \quad \nu = 1, 2 \quad (6.12)$$

En suivant van Kampen [85], le développement aux grands N de l'équation maîtresse sur $P(M_1, M_2, t)$ donne une équation de Fokker-Planck sur $P(x_1, x_2, t)$:

$$\partial_t P = -\partial_{x_1} \mathcal{J}_1 - \partial_{x_2} \mathcal{J}_2 \quad (6.13)$$

où le courant de probabilité s'écrit

$$\mathcal{J}_\nu = f_\nu(x_1, x_2) P - D_\nu \partial_{x_\nu} P \quad (6.14)$$

La force $\vec{f} = (f_1, f_2)$ ne dérive pas d'un potentiel, à moins que le système ne soit à l'équilibre ($\varepsilon = 0$). Son expression explicite est

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= ((\beta_1 - 2)x_1 + \beta_1 x_2) \cosh \beta_1 m - 2\beta_1 m_1 \sinh \beta_1 m (x_1 + x_2) \\ f_2(x_1, x_2) &= ((\beta_2 - 2)x_2 + \beta_2 x_1) \cosh \beta_2 m - 2\beta_2 m_2 \sinh \beta_2 m (x_1 + x_2) \end{aligned} \quad (6.15)$$

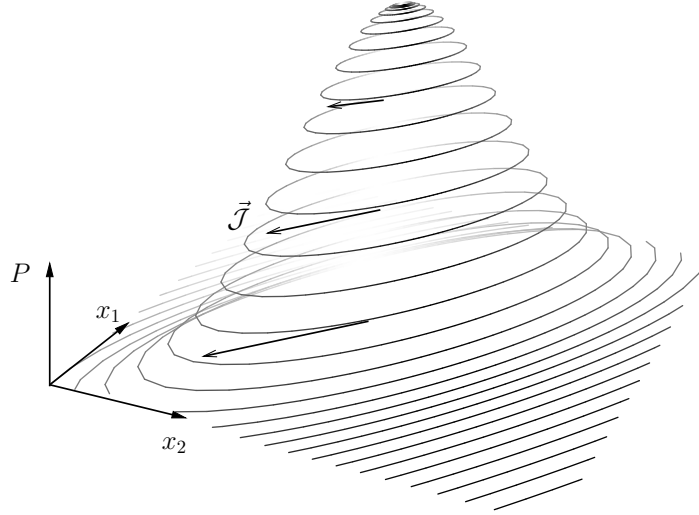


FIG. 6.1 – Distribution de probabilité dans l’espace (x_1, x_2) des fluctuations d’aimantation (6.12) des groupes de spins 1 et 2. Les lignes d’isoprobabilité $P(x_1, x_2) = \text{Cste}$ coïncident avec les lignes du courant de probabilité \vec{J} . Les paramètres sont $\beta = 0.8$, $\varepsilon = 0.7$.

et les constantes de diffusion s’écrivent $D_\alpha = \cosh \beta_\alpha m - 2m_\alpha \sinh \beta_\alpha m = \sqrt{1 - 4m_\alpha^2}$. Les forces sont linéaires en les “coordonnées” x_1 et x_2 , ce qui incite à rechercher la distribution stationnaire $P(x_1, x_2)$ sous forme gaussienne. Une telle solution existe bien. Dans la phase haute température ($\beta < 1$, $m = m_1 = m_2 = 0$), elle s’écrit

$$P(x_1, x_2) \propto \exp \left[-\frac{1-\beta}{2}(x_1 + x_2)^2 - \frac{2}{4+J^2}(x_1[1-J/2] - x_2[1+J/2])^2 \right] \quad (6.16)$$

où $J = \frac{2\varepsilon}{2-\beta}$ est le flux d’énergie traversant le système. On peut visualiser les lignes du courant de probabilité \vec{J} , qui sont spécifiques des systèmes hors d’équilibre ($\vec{J} = \vec{0}$ dans les systèmes à l’équilibre). On trouve que ce sont des ellipses, qui coïncident avec les lignes d’isoprobabilité (figure 6.1). Dans les systèmes où les forces ne sont pas linéaires, on observera des lignes de courant qui ne sont pas elliptiques.

6.3 Grandes déviations du courant d’énergie

6.3.1 État- s associé au courant d’énergie Q

Les fluctuations du courant d’énergie Q sont décrites par la fonction génératrice de ses cumulants $\psi_Q(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \langle e^{-sQ} \rangle$ (avec les notations du chapitre 1). En suivant le formalisme développé au chapitre 2, on s’intéresse à l’évolution temporelle de la transformée de Laplace $\hat{P}(M_1, M_2, s, t) = \sum_Q e^{-sQ} P(M_1, M_2, Q, t)$, qui se comporte aux grands temps en $e^{t\psi_Q(s)}$. Le vecteur $|\Psi(s, t)\rangle = \sum_{M_1, M_2} \hat{P}(M_1, M_2, s, t) |M_1, M_2\rangle$, obéit à une équation d’évo-

lution linéaire $\partial_t |\Psi(s, t)\rangle = \mathbb{W}_Q |\Psi(s, t)\rangle$ où l'opérateur d'évolution s'écrit

$$\begin{aligned} \mathbb{W}_Q = & \sum_{j \in 1} \left(\sigma_j^x e^{+2s\sigma_j^z (M^z - \sigma_j^z)/N} - 1 \right) e^{-\beta_1 \sigma_j^z M^z / N} \\ & + \sum_{j \in 2} \left(\sigma_j^x e^{-2s\sigma_j^z (M^z - \sigma_j^z)/N} - 1 \right) e^{-\beta_2 \sigma_j^z M^z / N} \end{aligned} \quad (6.17)$$

La fonction $\psi_Q(s)$ est obtenue comme valeur propre maximale de $\mathbb{W}_Q |\Psi(s, t)\rangle$. L'opérateur (6.17) n'est pas symétrisable car la dynamique ne vérifie pas le bilan détaillé. En revanche, inspiré par [90, 113], on peut effectuer la transformation de similitude

$$\tilde{\mathbb{W}}_Q \equiv e^{-\beta(M^z)^2/4N} \mathbb{W}_Q e^{+\beta(M^z)^2/4N} \quad (6.18)$$

$$\begin{aligned} = & \sum_{j \in 1} \left(-e^{-\beta_1 \sigma_j^z M^z / N} + \sigma_j^x e^{+(2s-\varepsilon)\sigma_j^z M^z / N - (2s+\beta)/N} \right) \\ & + \sum_{j \in 2} \left(-e^{-\beta_2 \sigma_j^z M^z / N} + \sigma_j^x e^{-(2s-\varepsilon)\sigma_j^z M^z / N + (2s-\beta)/N} \right) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Les spectres de $\tilde{\mathbb{W}}_Q$ et \mathbb{W}_Q sont identiques et le théorème de fluctuation $\psi_Q(s) = \psi_Q(\varepsilon - s)$ se déduit immédiatement de la propriété

$$(\mathbb{W}_Q(s))^\dagger = \mathbb{W}_Q(\varepsilon - s) \quad (6.20)$$

6.3.2 Fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$

En suivant la méthode exposée au paragraphe 2.1.6 (états cohérents de spin), on peut déterminer l'énergie libre à la Landau $\mathcal{F}(m_1, m_2, s)$ telle que, à l'ordre dominant en N

$$\psi_Q(s) = -N \min_{\substack{-\frac{1}{2} \leq m_1 \leq \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \leq m_2 \leq \frac{1}{2}}} \mathcal{F}(m_1, m_2, s) + \mathcal{O}(1) \quad (6.21)$$

On obtient un résultat indépendant de s :

$$\mathcal{F}(m_1, m_2, s) = \sum_{\nu=1,2} \left\{ \sqrt{1 - 4m_\nu^2} - \frac{1}{2} \cosh [\beta_\nu(m_1 + m_2)] + m_\nu \sinh [\beta_\nu(m_1 + m_2)] \right\} \quad (6.22)$$

Le minimum dans (6.21) est atteint pour les solutions de l'équation de champ moyen (6.5-6.6), pour toute valeur de s (contrairement par exemple au $m_+(s)$ du modèle à une température, figure 2.2). L'aimantation moyenne des configurations observées pour de grandes déviations du courant d'énergie ($s > 0$) reste donc la même que dans l'état stationnaire ($s = 0$). Toute la dépendance en s de $\psi_Q(s)$ est contenue dans les corrections d'ordre 1 à (6.21). En utilisant, comme au paragraphe 2.1.7, la représentation de Holstein-Primakoff des opérateurs d'aimantation, on obtient

$$\psi_Q(s) = c_1 + c_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_1}{c_1} + \frac{\beta_2}{c_2} \right) - \sqrt{\left[c_1 + c_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_1}{c_1} + \frac{\beta_2}{c_2} \right) \right]^2 + \frac{4}{c_1 c_2} s(\varepsilon - s)} \quad (6.23)$$

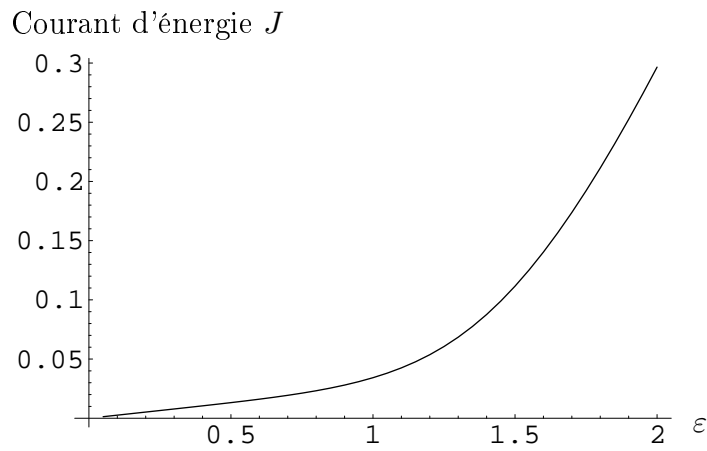


FIG. 6.2 – Courant d'énergie moyen J en fonction de $\varepsilon \in [0, \beta]$ à $\beta = 2$ (phase ordonnée). En phase désordonnée, le courant est simplement proportionnel à ε .

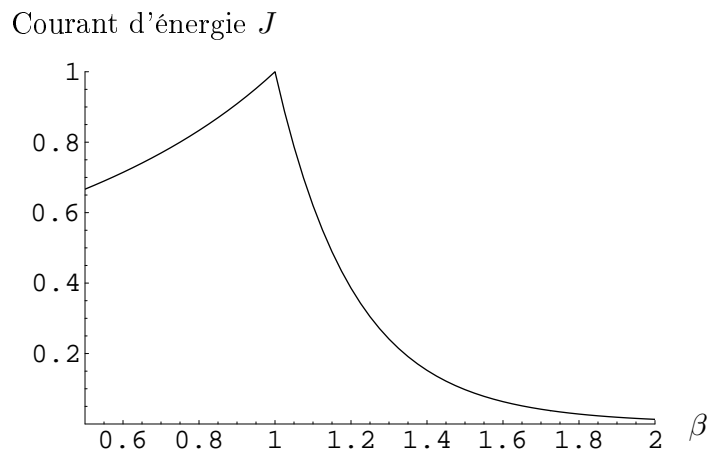


FIG. 6.3 – Courant d'énergie moyen J en fonction de bêta $\beta \in [0.5, 2]$ à $\varepsilon = 0.5$.

où $c_\nu = \cosh(\beta_\nu m) = 1/\sqrt{1 - 4m_\nu^2}$ et m_ν est la solution de l'équation de champ moyen (6.5-6.6).

Le courant d'énergie à "champ" $\varepsilon = 0.5$ fixé est tracé en fonction de $\beta \in [0.5, 2]$ sur la figure 6.3. Le courant reste fini et continu au point critique ($\beta = 1$).

En utilisant la forme explicite (6.23) de $\psi_Q(s)$, on trouve, en dérivant par rapport à s , l'expression du coefficient de diffusion $D(\beta)$ comme réponse du système au champ ε , ainsi que $\sigma(\beta)$ comme variance du courant

$$D(\beta) = \left. \frac{\partial J(\beta_1, \beta_2)}{\partial \beta_1} \right|_{\beta_1=\beta_2=\beta}, \quad \sigma(\beta) = \left. \frac{\langle Q^2 \rangle_c}{t} \right|_{\beta_1=\beta_2=\beta} \quad (6.24)$$

Ces fonctions vérifient une relation de Green-Kubo généralisée, sous forme intégrale :

$$2 \int_{\beta_2}^{\beta_1} d\beta \frac{D(\beta)}{\sigma(\beta)} = \varepsilon \quad (6.25)$$

On peut également faire apparaître cette relation comme une conséquence directe du théorème de fluctuation (6.20).

Dans notre système, la connaissance des fonctions $D(\beta)$ et $\sigma(\beta)$ ne permet pas de remonter à la distribution complète $\psi_Q(s)$. À notre connaissance, il n'y a que dans le TASEP que la fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ avait déjà été calculée pour un système où l'hydrodynamique fluctuante ne s'applique pas. Dans notre modèle, $\psi_Q(s)$ a de plus l'avantage de vérifier le théorème de fluctuation (ce qui n'est pas le cas dans le TASEP car les mouvements y sont strictement irréversibles).

Chapitre 7

Fluctuations dans le Processus d'Exclusion Symétrique

Nous nous intéressons aux fluctuations de deux observables macroscopiques (le courant total et le nombre d'événements) dans le processus d'exclusion symétrique. Les fluctuations de ces deux observables sont décrites par des fonctions d'échelle universelles qui présentent des liens inattendus. Ces travaux ont été effectués en collaboration avec Cécile Appert-Rolland, Bernard Derrida et Frédéric van Wijland.

7.1 Introduction

7.1.1 Présentation du modèle

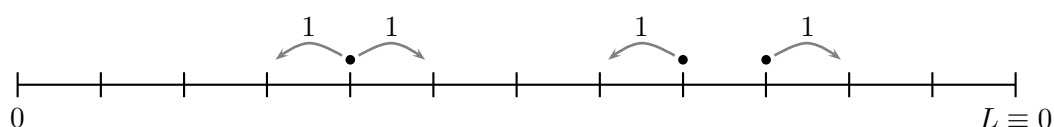


FIG. 7.1 – Dynamique du modèle d'exclusion symétrique : chaque particule peut sauter avec un taux 1 vers un site voisin, si le site d'arrivée est vide. En conditions aux limites périodiques, les sites 0 et L sont identifiés.

Le processus d'exclusion symétrique (SEP) [122] en dimension 1 est défini sur un réseau de taille L , chaque site i étant vide ($n_i = 0$) ou occupé par une particule ($n_i = 1$). Les particules peuvent sauter avec un taux 1 vers un site voisin, s'il est vide. Le SEP et sa généralisation asymétrique (ASEP), où les taux de saut vers la gauche et vers la droite ne sont pas égaux, font partie des systèmes de particules en interaction les plus simples à définir et les mieux étudiés (*cf.* [33] pour une revue). En conditions aux limites ouvertes (des particules peuvent entrer et sortir aux extrémités du réseau), l'état stationnaire est connu exactement [30, 31].

Le système présente une transition entre plusieurs états (embouteillés, vides, ou de courant maximal) suivant les taux d'entrée et sortie des particules aux extrémités. Ces résultats sont par exemple obtenus par une méthode de matrices [31, 49]. Cette même méthode permet d'obtenir la probabilité d'observer un profil de densité donné dans l'état stationnaire [36, 37], à la limite des grandes tailles de système.

7.1.2 Motivations

En ce qui concerne les fluctuations de courant, on peut classer les résultats de la littérature en trois catégories :

- (i) Dans le modèle totalement asymétrique (TASEP), en conditions aux limites périodiques, Derrida et Lebowitz [34], Derrida et Appert [35] ont obtenu la fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ du courant total traversant le système, en toutes tailles. La méthode utilisée repose sur l'Ansatz de Bethe. Le résultat montre qu'à la limite thermodynamique le TASEP appartient à la classe KPZ [86]. Dans le cas partiellement asymétrique, seuls les deux premiers cumulants du courant sont connus, grâce à la méthode des matrices (Derrida et Mallick, [32]).
- (ii) En conditions aux limites ouvertes, avec injection de particules aux extrémités, Derrida, Douçot et Roche [38] ont obtenu les premiers cumulants du courant en toutes tailles, conjecturant une expression générale pour $\psi_Q(s)$ à la limite thermodynamique. Les cumulants sont obtenus grâce à une théorie de perturbation en s .
- (iii) Enfin, dans le cas précédent, Bodineau et Derrida [18, 19, 20] ont proposé un “principe d'additivité” qui permet de retrouver le résultat de cette conjecture. On consultera la partie 5.3 pour un exposé de ce principe. Le résultat obtenu décrit les grandes déviations du courant total Q , dans un certain régime d'échelle du courant Q en fonction de la taille L du système. La méthode redonne les résultats de l'hydrodynamique fluctuante [123], dans l'approche de Bertini *et al* [14, 15, 16].

Dans ce chapitre, nous nous focalisons sur la version symétrique, en conditions aux limites périodiques (figure 7.1). Le nombre de particules est fixé, égal à N . L'état d'équilibre est uniforme (toutes les configurations sont équiprobables). Nous nous intéressons aux aspects dynamiques, au moyen des fonctions de grandes déviations $\psi_Q(s)$ et $\psi_K(s)$ associées respectivement au courant total et au nombre d'événements. Dans une première partie, nous présentons les résultats exacts que nous avons obtenus en utilisant des méthodes similaires à celles des points (i) et (ii) ci-dessus. Dans une seconde partie, nous montrons que certains de ces résultats peuvent être obtenus à la limite thermodynamique par une approche beaucoup moins technique, basée sur l'hydrodynamique fluctuante (dans sa version Edwards-Wilkinson).

7.2 Résultats exacts

Dans tout ce qui suit, nous noterons $z = e^{-s}$ et $\rho = N/L$.

7.2.1 Théorie de perturbation

Pour une observable A du type (1.43), l'état- s stationnaire $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s)$, défini à l'éq. (1.62) (paragraphe 1.4.3) est valeur propre de l'opérateur \mathbb{W}_A , autrement dit :

$$\psi_A(s) \tilde{P}_A(\mathcal{C}, s) = \sum_{\mathcal{C}'} \left[e^{-s\alpha(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - r(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \right] \tilde{P}_A(\mathcal{C}', s) \quad (7.1)$$

Ainsi, pour une observable $\mathcal{O}(\mathcal{C})$, la moyenne $\langle \mathcal{O}(\mathcal{C}) \rangle_s = \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{O}(\mathcal{C}) \tilde{P}_A(\mathcal{C}, s)$ de \mathcal{O} dans l'état- s obéit à :

$$\psi_A(s) \langle \mathcal{O}(\mathcal{C}) \rangle_s = \left\langle \sum_{\mathcal{C}'} e^{-s\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \mathcal{O}(\mathcal{C}') \right\rangle_s - \langle r(\mathcal{C}) \mathcal{O}(\mathcal{C}) \rangle_s \quad (7.2)$$

On appelle

$$C_k = \langle n_{j_1} \cdots n_{j_k} \rangle \quad (7.3)$$

la fonction de corrélation spatiale à k points dans l'état stationnaire ($s = 0$). Par définition, tous les j_ℓ sont différents. Dans l'état- s , on note les fonctions de corrélation

$$C(r) = \langle n_j n_{j+r} \rangle_s \quad (7.4)$$

$$C(r_1, r_2) = \langle n_j n_{j+r_1} n_{j+r_2} \rangle_s \quad (7.5)$$

$$C(r_1, r_2, r_3) = \langle n_j n_{j+r_1} n_{j+r_2} n_{j+r_3} \rangle_s \quad (7.6)$$

...

Guidés par [38], nous allons montrer qu'il est possible de déterminer $\psi_K(s)$ et les $C(r)$, $C(r_1, r_2)$, ... perturbativement en s . On note leur développement au voisinage de 0 :

$$\psi_A(s) = \psi_A^{(0)} + s\psi_A^{(1)} + s^2\psi_A^{(2)} + \dots \quad (7.7)$$

$$C(r) = C^{(0)}(r) + sC^{(1)}(r) + s^2C^{(2)}(r) + \dots \quad (7.8)$$

Dans la suite de ce paragraphe, on considère la quantité $A = K$. En appliquant l'identité (7.2) à l'observable $\mathcal{O} = 1$, on obtient

$$\psi_K(s) = (z - 1) \langle r(\mathcal{C}) \rangle_s = 2(z - 1)L [\rho - C(1)] \quad (7.9)$$

On a utilisé la conservation du nombre de particules (vérifiée également dans la dynamique s -modifiée), qui implique que $\langle n_i \rangle_s = \rho$, ainsi que l'invariance par translation, qui entraîne que $\langle n_j n_{j+1} \rangle_s$ ne dépend pas de j . D'après (7.9), on voit que pour connaître $\psi_K(s)$ à l'ordre 2 en s , il suffit de connaître $C(1)$ à l'ordre 1. Pour illustrer la méthode un rang plus loin, nous allons détailler l'obtention de $C(1)$ à l'ordre 1 à partir des fonctions à deux points à l'ordre 0 en s (qui sont connues, ce sont les mêmes que dans le TASEP, cf. paragraphe 1.5.4). On

applique maintenant l'identité (7.2) aux observables $\mathcal{O} = n_i n_{i+1}$ et $\mathcal{O} = n_i n_{i+r}$ ($r > 1$). En notant

$$X \equiv -\frac{N(N-1)(L-N)(L-N-1)}{L(L-1)^2(L-2)} \quad (7.10)$$

les équations correspondantes deviennent, une fois développées en puissances de s :

$$C^{(1)}(2) - C^{(1)}(1) = X \quad (7.11)$$

$$C^{(1)}(r+1) + C^{(1)}(r-1) - 2C^{(1)}(r) = -2\frac{X}{L-3} \equiv Y \quad (7.12)$$

La différence $\delta(r) = C^{(1)}(r+1) - C^{(1)}(r)$ vérifie les équations

$$\delta(1) = X \quad (7.13)$$

$$\delta(r) - \delta(r-1) = Y \quad \text{pour } 2 \leq r \leq L-2 \quad (7.14)$$

et on obtient

$$\delta(r) = C^{(1)}(r+1) - C^{(1)}(r) = X + (r-1)Y \quad (7.15)$$

D'où, en particulier, en sommant entre 1 et $r-1$

$$C^{(1)}(r) - C^{(1)}(1) = (r-1)X + \frac{1}{2}(r-1)(r-2)Y \quad (7.16)$$

L'équation manquante pour résoudre ce système vient de la relation

$$n_1 \sum_{r=2}^L n_r = n_1(N - n_1) = n_1(N - 1) \quad (7.17)$$

qui provient des conditions aux limites périodiques. En moyennant dans l'état- s :

$$\sum_{r=2}^L \langle n_1 n_r \rangle_s = (N-1) \langle n_1 \rangle_s \quad (7.18)$$

et en développant à l'ordre 1, on trouve pour la fonction $C^{(1)}(r)$ que $\sum_{r=1}^{L-1} C^{(1)}(r) = 0$. On peut maintenant déterminer $C^{(1)}(r)$ grâce à l'équation (7.16). Cela donne

$$C^{(1)}(1) = -\frac{1}{L-1} \sum_{r=1}^{L-1} \left[(r-1)X + \frac{1}{2}(r-1)(r-2)Y \right] = \frac{N(N-1)(L-N)(L-N-1)}{6L(L-1)^2} \quad (7.19)$$

Au passage, on a aussi la fonction de corrélation dans l'état- s

$$C^{(1)}(r) = \frac{N(N-1)(L-N)(L-N-1)(L^2 + L - 6rL + 6r^2)}{6L(L-1)^2(L-2)(L-3)} \quad (7.20)$$

Et grâce à (7.9), on peut enfin déterminer

$$\psi_K^{(2)}(s) = \frac{N(L-N)(2L-2+LN-N^2)}{3(L-1)^2} \quad (7.21)$$

On peut poursuivre ordre par ordre l'étude de la hiérarchie d'équations sur les fonctions de corrélation dans l'état- s . On trouve que les $C^{(p)}(r_1, \dots, r_\ell)$ sont des fonctions polynomiales de r_1, \dots, r_ℓ . En utilisant un logiciel de calcul formel, on obtient le développement suivant à l'ordre s^4 (il faut résoudre 2^{2p-2} équations pour passer de l'ordre s^{p-1} à l'ordre s^p) :

$$\begin{aligned} \psi_K(s) = & -2Rs + \frac{1}{3}R(R+2)s^2 + \frac{1}{45}[LR(R-1) - 3(R^2+4)]s^3 \\ & + \frac{R}{L-3} \left\{ \frac{(R-1)R(5R-6)L^3}{1890} - \frac{(R-1)R(35R-34)L^2}{1890} + \right. \\ & \left. \frac{(175R^3 - 308R^2 + 184R + 264)L}{3780} + \frac{-17R^3 + 28R^2 - 28R - 88}{420} \right\} + \mathcal{O}(s^5) \end{aligned} \quad (7.22)$$

Le résultat est exprimé en fonction de la variable $R = N(L-N)/(L-1)$, qui fait apparaître explicitement la symétrie particule-trou du SEP. À la limite thermodynamique (N et L grands, $\rho = N/L$ fixé), on obtient

$$\begin{aligned} \psi_K(s) = & -2\rho(1-\rho)Ls + \frac{1}{3}[\rho(1-\rho)]^2L^2s^2 + \frac{1}{45}[\rho(1-\rho)]^3L^4s^3 \\ & + \frac{1}{378}[\rho(1-\rho)]^4L^6s^4 + \mathcal{O}(L^8s^5) \end{aligned} \quad (7.23)$$

De même, on obtient la fonction de corrélation $C(r)$ dans l'état- s , à la limite thermodynamique ($r = Lx$) :

$$\begin{aligned} C(x) = & \rho^2 + \frac{1}{6}(1-6(1-x)x)[\rho(1-\rho)]^2Ls + \frac{1}{90}[1-30x^2(1-x)^2][\rho(1-\rho)]^3L^3s^2 \\ & + \frac{1}{756}[1-21x^2(1-x)^2(1+2x(1-x))][\rho(1-\rho)]^4L^5s^3 + \mathcal{O}(L^7s^4) \end{aligned} \quad (7.24)$$

Ces deux développements suggèrent l'existence d'une fonction d'échelle, que nous obtiendrons dans la partie 7.3 grâce à une version de l'hydrodynamique fluctuante qui tient compte des fluctuations du profil de densité dans l'état- s .

7.2.2 Théorie de perturbation pour Q

Dans l'état- s associé à Q , on obtient à nouveau grâce à (7.2) une hiérarchie d'équations sur les fonctions de corrélation. Elle se résout perturbativement, puissance paire par puissance paire de s . On trouve exactement¹, à N et L fixés et $s \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \psi_Q(s) = & Rs^2 + \frac{1}{12}R^2s^4 - \frac{1}{360(L-2)}[(L^2-L+2)R^3 - L^2R^2]s^6 \\ & + \frac{R^2[(10L^4 - 2L^3 + 27L^2 - 15L + 18)R^2 - 2(11L^2 - L + 12)L^2R + 12L^4]}{60480(L-2)(L-3)}s^8 + \mathcal{O}(s^{10}) \end{aligned} \quad (7.25)$$

¹À nouveau, l'obtention de ce résultat est assez technique : il faut déterminer la fonction de corrélation à 6 points à l'ordre s^2 , ce qui demande d'écrire et de résoudre un système de $\simeq 128$ équations polynomiales.

avec toujours $R = N(L - N)/(L - 1)$. À la limite thermodynamique, (7.25) devient

$$\begin{aligned} \psi_Q(s) = & \rho(1 - \rho)Ls^2 + \frac{1}{12}L^2[\rho(1 - \rho)]^2s^4 - \frac{1}{360}L^4[\rho(1 - \rho)]^3s^6 \\ & + \frac{1}{6048}L^6[\rho(1 - \rho)]^4s^8 + \mathcal{O}(L^8s^{10}) \end{aligned} \quad (7.26)$$

Ce résultat, tout comme celui pour K (éq. 7.23), décrit les fluctuations pour s proche de 0, c'est-à-dire pour des déviations du courant qui restent du même ordre de grandeur que le courant stationnaire. Il faut utiliser un autre outil que la théorie des perturbations pour accéder à un régime où les déviations échellent différemment avec la taille du système. L'Ansatz de Bethe [17] fournit cette possibilité (cf. l'annexe G pour une introduction).

7.2.3 Ansatz de Bethe pour Q (I)

On peut représenter chaque nombre d'occupation $n_i = 0$ ou 1 par un spin $s_i = 2n_i - 1$. Suivant [119], l'opérateur d'évolution associé au courant total Q peut s'écrire en fonction des opérateurs de Pauli $\sigma_i^{x,y,z}$ agissant au site i :

$$\mathbb{W}_Q(s) = \sum_{i=1}^L \left[\frac{\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - 1}{2} + z \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + z^{-1} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ \right] \quad (7.27)$$

où $\sigma_i^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_i^x \pm \sigma_i^y)$. L'opérateur (7.27) représente une “chaîne de spin” XXZ. La valeur propre maximale de $\mathbb{W}_Q(s)$, à nombre de particules fixé (c'est-à-dire à aimantation totale $M = \sum_i \sigma_i$ fixée) vaut $\psi_Q(s)$. En suivant Lebowitz et Spohn [93], il est tentant d'utiliser les résultats obtenus par Kim [87] pour la chaîne XXZ : le fondamental de l'opérateur

$$H = \sum_{i=1}^L \left\{ \frac{1}{4} \tilde{\Delta} (1 - \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) - \frac{1 - S}{2} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- - \frac{1 + S}{2} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ \right\} \quad (7.28)$$

pour $\tilde{\Delta}$ inférieur à 1 (mais proche de 1) est donné à la limite thermodynamique ($L \rightarrow \infty$, $M \equiv \sum_i \sigma_i \rightarrow \infty$, $m \equiv M/L$ fixé) par

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \min \text{Sp } H = & -\frac{1}{4}(1 - m^2)(1 - \tilde{\Delta}) \\ & - \frac{1}{20} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^{2/3} S^{-2/3} (1 - m^2)^{4/3} (1 - \tilde{\Delta})^{5/3} \left\{ 1 + \mathcal{O}(1 - \tilde{\Delta})^{2/3} \right\} \end{aligned} \quad (7.29)$$

Pour faire le lien avec l'opérateur d'évolution \mathbb{W}_Q du courant pour le SEP, on peut remarquer que $\mathbb{W}_Q = -xH$ avec

$$x = \frac{1}{2} \cosh s, \quad \tilde{\Delta} = \frac{1}{\cosh s}, \quad S = \tanh s \quad (7.30)$$

En insérant ses relations aveuglément dans (7.29), et grâce $m = 2\rho - 1$, on obtient (comme dans [93], à un facteur 2 près qui vient d'un choix différent pour les taux de saut) :

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = \rho(1 - \rho)s^2 + \frac{2^{\frac{1}{3}}(2\pi)^{\frac{2}{3}}}{10} [\rho(1 - \rho)]^{\frac{4}{3}} |s|^{\frac{8}{3}} + \dots \quad \text{pour } s < 0. \quad (7.31)$$

Il faut toutefois prendre garde au domaine dans lequel le résultat de Kim est valide. Dans les notations du modèle à six vertex, ($\tilde{\Delta} = \Delta / \cosh(2H)$, $S = \tanh(2H)$, $\Delta = \cosh \nu$ cf. eqs (5), (6) de [87]), les relations (7.30) deviennent

$$\Delta = 1, \quad 2H = s, \quad \nu = 0 \quad (7.32)$$

L'opérateur étudié correspond donc au point critique $\Delta = 1$, qui n'est pas étudié par Kim dans [87], car son étude repose sur l'hypothèse $\nu > 0$ (cf. le paragraphe après l'eq. (6) de [87]). Précisément, le changement de variables (7) de [87] n'est pas défini. Dans ses notations, $\alpha = 1$ pour $\Delta = 1$, et ses équations (7-8) ne sont plus utilisables, ce qui rend inexploitable sa dérivation si on cherche à l'étendre au cas $\Delta = 1$. Il est donc nécessaire de repartir d'une approche directe des équations de Bethe, comme proposé ci-après (paragraphe 7.2.5). Nous présentons en premier lieu la méthode pour K , qui s'avère plus simple.

7.2.4 Ansatz de Bethe pour K

L'opérateur d'évolution associé à K s'écrit

$$\mathbb{W}_K(s) = \sum_{i=1}^L \left[\frac{\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - 1}{2} + z(\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+) \right] \quad (7.33)$$

On voit facilement que cet opérateur se met sous la forme $\mathbb{W}_K = -xH$ avec

$$x = z, \quad \tilde{\Delta} = z^{-1}, \quad S = 0 \quad (7.34)$$

mais Kim n'étudie pas le point $S = 0$: on ne peut pas utiliser l'expression 7.29 du fondamental. Nous présentons ici en détail une méthode, également basée sur l'Ansatz de Bethe, pour décrire un régime de fluctuations qui n'est pas atteint par la théorie de perturbation.

On se place dans l'espace des états à N particules. Il s'agit de rechercher l'état propre $\tilde{P}_K(\mathbf{n} \equiv \{n_i\}, s)$ de \mathbb{W}_K correspondant à $\psi_K(s)$ sous la forme d'une superposition de N "ondes planes" (voir [70, 87] et l'annexe G) :

$$\tilde{P}_K(\mathbf{n}, s) = \sum_P \mathcal{A}(P) \prod_{i=1}^N [\zeta_{p(i)}]^{x_i} \quad (7.35)$$

où les $P = (p(1), \dots, p(N))$ représentent les permutations de $(1, \dots, N)$, x_i est la position de la $i^{\text{ème}}$ particule, et les ζ_i sont des nombres complexes – qui *a priori* ne sont pas nécessairement de la forme e^{ik} avec k réel, malgré la terminologie d'« onde plane » [70]. Pour être un vecteur propre de \mathbb{W}_K , les ζ_i doivent satisfaire certaines contraintes (annexe G), appelées équations de Bethe

$$\zeta_i^L = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[-\frac{1 - 2e^s \zeta_i + \zeta_i \zeta_j}{1 - 2e^s \zeta_j + \zeta_i \zeta_j} \right], \quad (7.36)$$

L'expression de $\psi_K(s)$ est donnée par

$$\psi_K(s) = e^{-s} \sum_{j=1}^N \left(\zeta_j + \frac{1}{\zeta_j} \right) - 2N \quad (7.37)$$

Suivant Baxter [7, p.162], dans la limite $s \rightarrow 0^-$ (i.e. $z \rightarrow 1^+$), et à la limite des grands systèmes ($L \rightarrow \infty$, $\rho = N/L$ fixé), les ζ_j sont distribués de manière dense sur un arc fini du cercle unité. Dans le régime de s que nous allons étudier, nous cherchons les ζ_j sous la forme $\zeta_j = e^{ik_j\delta}$ avec $\cos \delta = e^s$ ($\delta \rightarrow 0$ lorsque $s \rightarrow 0^-$). Le développement des équations de Bethe au premier ordre en δ donne

$$k_i = \frac{2}{L} \sum_{j \neq i} \frac{1 - k_i k_j}{k_i - k_j} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (7.38)$$

En notant $L\rho_0(k)dk$ le nombre de k_j entre k et $k + dk$, on doit avoir

$$k = 2\mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \rho_0(k') \frac{1 - kk'}{k - k'} \quad (7.39)$$

en supposant les k continûment distribués sur $[-Q_0, Q_0]$. La fonction ρ_0 doit également vérifier $\int_{-Q_0}^{Q_0} dk \rho_0(k) = \rho$. On trouve que les deux inconnues ρ_0 et Q_0 ont pour expression

$$\rho_0(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{Q_0^2 - k^2}}{1 - k^2}, \quad Q_0 = 2\sqrt{\rho(1 - \rho)} \quad (7.40)$$

La valeur propre maximale s'obtient à partir de (7.37) :

$$\frac{1}{L} \psi_K(s) = 2e^{-s} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk \rho(k) \cos(\delta k) - 2\rho \quad (7.41)$$

et on trouve explicitement

$$\frac{1}{L} \psi_K(s) = -2\rho(1 - \rho)s + o(s) \quad (7.42)$$

On se place toujours dans la limite des grandes tailles. Jusqu'à présent, rien de très grisant, car on savait déjà déterminer la valeur moyenne de K par un argument simple – précisément, (7.42) se déduit de $\left. \frac{d\psi_K(s)}{ds} \right|_{s=0} = -\langle r(\mathcal{C}) \rangle = -2L\rho(1 - \rho)$. Pour obtenir la contribution suivante, qui nous renseigne vraiment sur les fluctuations de K , il faut étendre l'approche de Baxter. Nous exposons dans l'annexe H le détail du calcul, assez nouveau, qui présente un point technique délicat. On arrive à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \psi_K(s) &= 2e^{-s} \int_{-Q}^Q dk \rho(k) \cos(\delta k) - 2\rho \\ &= -2\rho(1 - \rho)s + \frac{2^{7/2}}{3\pi} [\rho(1 - \rho)]^{3/2} |s|^{3/2} + \mathcal{O}(s^2) \end{aligned} \quad (7.43)$$

En utilisant l'algorithme exposé au chapitre 3, on obtient des résultats numériques en accord le terme en $|s|^{3/2}$ (figure 7.2).

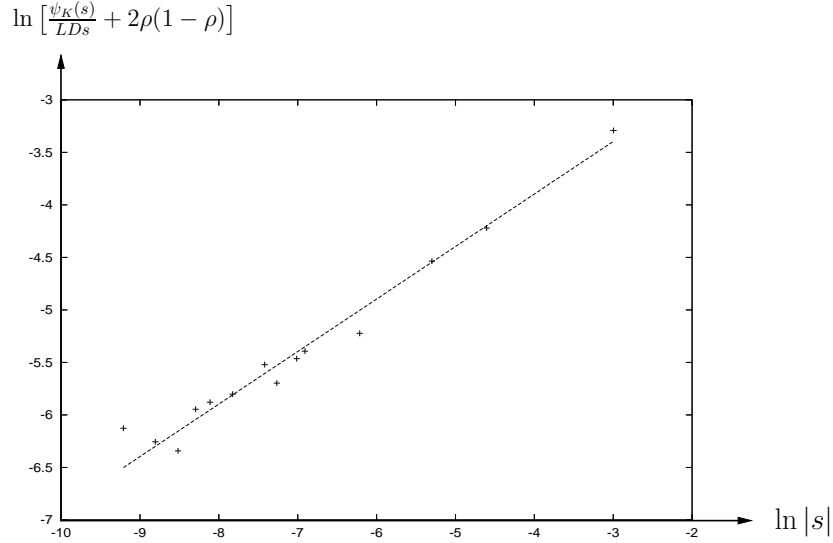


FIG. 7.2 – Tracé de $\psi_K(s)/(Ls) + 2\rho(1 - \rho)$ pour $s < 0$ en coordonnées logarithmiques. La ligne correspond au développement limité (7.43), exact à la limite $L \rightarrow \infty$. Les points sont obtenus numériquement en utilisant la procédure exposée au chapitre 3 ($L = 500$, $\rho = 1/2$).

7.2.5 Ansatz de Bethe pour Q (II)

Les contraintes sur les vecteurs d'onde s'écrivent maintenant

$$\zeta_i^L = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[-\frac{1 - 2e^{-s}\zeta_i + e^{-2s}\zeta_i\zeta_j}{1 - 2e^{-s}\zeta_j + e^{-2s}\zeta_i\zeta_j} \right], \quad (7.44)$$

et la fonction de grandes déviations est donnée par

$$\psi_Q(s) = -2N + e^{-s}[\zeta_1 + \dots + \zeta_N] - e^s \left[\frac{1}{\zeta_1} + \dots + \frac{1}{\zeta_N} \right] \quad (7.45)$$

Pour \mathbb{W}_K , dans l'approche de Baxter [7], les ζ_j sont sur le cercle unité. Ce qui n'est plus le cas pour \mathbb{W}_Q car la chaîne XXY correspondante est asymétrique ($S \neq 1$, cf [87]). À l'ordre minimal en $s \rightarrow 0$, on note maintenant $\zeta_j = e^{-sk_j}$ où k_j est un nombre complexe. Cette loi d'échelle en s sera vérifiée par auto-consistance. À l'ordre dominant, les équations de Bethe deviennent

$$k_i = \frac{2}{L} \sum_{j \neq i} \left\{ 1 + k_i + \frac{(1 + k_i)^2}{k_j - k_i} \right\} \quad (7.46)$$

Dans le continuum, les k_j se répartissent densément sur un chemin \mathcal{C} du plan complexe, et, pour tout k appartenant à \mathcal{C} , on a

$$\phi(k) \equiv \frac{k - 2\rho(1 + k)}{2(1 + k)^2} = \mathcal{P} \int_{\mathcal{C}} dk' \frac{g_0(k')}{k' - k} \quad (7.47)$$

où $dk g_0(k)$ est le nombre de moments k appartenant à un segment infinitésimal dk de \mathcal{C} autour de k . Ceci implique $\int_{\mathcal{C}} dk g_0(k) = \rho$. Nous verrons qu'à l'ordre minimal en s , la fonction de

grandes déviations $\psi_Q(s)$ ne dépend que des extrémités du chemin \mathcal{C} , et non de sa trajectoire précise, dès que l'on connaît la fonction $g_0(k)$ sur le plan complexe entier. Dans le continuum, la fonction de grandes déviations (7.45) devient

$$\frac{1}{L}\psi_Q(s) = -2\rho + 2 \int_{\mathcal{C}} dk g_0(k) \cosh[s(k+1)] \quad (7.48)$$

$$= s^2 \int_{\mathcal{C}} dk (1+k)^2 g_0(k) + \mathcal{O}(s^3) \quad (7.49)$$

En suivant Muskhelishvili [101, paragraphe 89], la solution bornée de (7.47) est donnée par

$$g_0(k) = -\frac{1}{\pi^2} \int_{\mathcal{C}} dk' \sqrt{\frac{(k-a)(k-b)}{(k'-a)(k'-b)}} \frac{\phi(k')}{k'-k} \quad (7.50)$$

et existe pourvu que

$$\int_{\mathcal{C}} dk \frac{\phi(k)}{\sqrt{(k-a)(k-b)}} = 0 \quad (7.51)$$

On a noté a et b les extrémités de \mathcal{C} . Les symétries des équations de Bethe impliquent que a est le complexe conjugué de b , et on note $a = re^{-i\theta}$, $b = re^{i\theta}$. La condition (7.51) se transforme en une relation entre ρ , r et θ :

$$\rho = \frac{1 - r^2 + 2r \cos \theta - \sqrt{1 + 2r^2 \cos 2\theta + r^4}}{4(1 - r^2)} \quad (7.52)$$

En insérant (7.50) dans $\int_{\mathcal{C}} dk g_0(k) = \rho$, on obtient une autre relation $\rho = \frac{r(r+\cos \theta)}{2(1+2r \cos \theta + r^2)}$. En combinant ces résultats, on obtient finalement

$$g_0(k) = \frac{1}{2i\pi} \frac{\sqrt{k^2 + 4(k+1)\rho}}{(k+1)^2}, \quad \rho = \cos^2 \theta, \quad r = -2 \cos \theta \quad (\text{avec } \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi) \quad (7.53)$$

Le chemin \mathcal{C} (déterminé par exemple en coordonnées polaires $k = R(\Theta)e^{i\Theta}$) est l'ensemble des points tels que $dk g_0(k) = (R' + iR)e^{i\Theta} d\Theta$ est réel (et positif). L'accord avec la résolution numérique directe des équations de Bethe discrètes est très correct (Fig. 7.3). La fonction de grandes déviations ne dépend que de r et θ , et on obtient d'après (7.48), (7.53) :

$$\frac{1}{L}\psi_Q(s) = s^2 \rho(1 - \rho) + \mathcal{O}(s^3) \quad (7.54)$$

comme attendu.

À l'ordre suivant en s , g_0 devient $g = g_0 + |s|g_1$, et ce développement en s est vérifié par auto-consistance. En développant les équations de Bethe au premier ordre en s , on obtient

$$sk = 2s \mathcal{P} \int_{\mathcal{C}} dk' \left[(1+k) + \frac{(1+k)^2}{k-k'} \right] g(k') + R(k, s) \quad (7.55)$$

où le reste $R(k, s)$ s'écrit

$$R(k, s) = -sk + \mathcal{P} \int_{\mathcal{C}} dk' g(k') \ln \left[-\frac{1 - 2e^{-s} e^{-sk} + e^{-2s} e^{-s(k+k')}}{1 - 2e^{-s} e^{-sk'} + e^{-2s} e^{-s(k+k')}} \right] \quad (7.56)$$

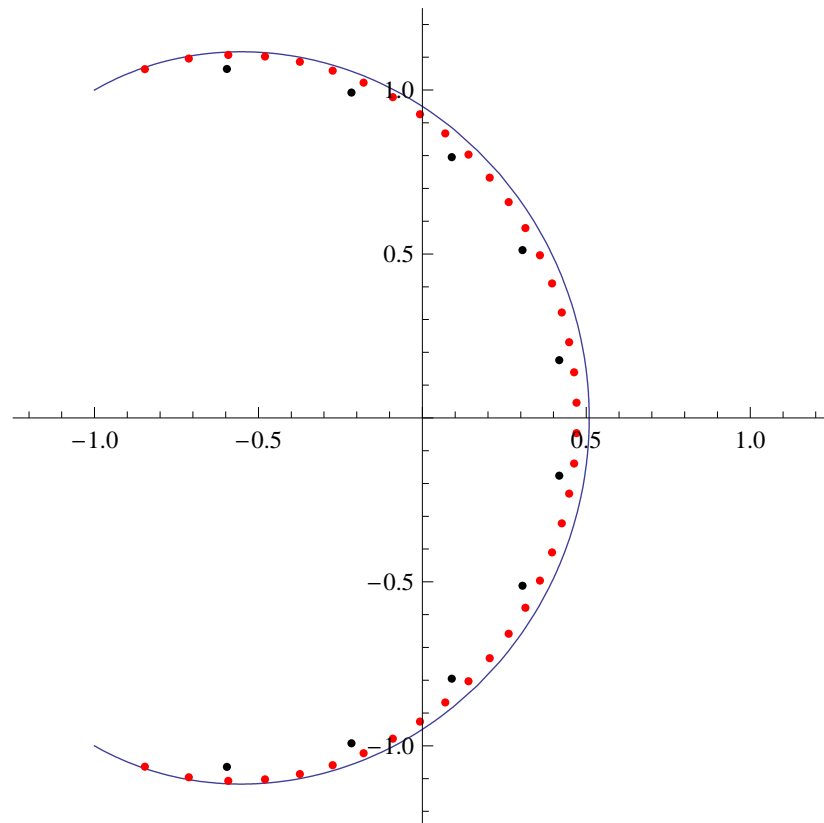


FIG. 7.3 – Répartition des moments complexes k_j : résolution à la limite du continuum (chemin \mathcal{C} en bleu) et solution des équations de Bethe discrètes ($\rho = 1/2$ avec $L = 20$ en noir, $L = 80$ en rouge).

À nouveau, la condition $\int_{\mathcal{C}} dk g(k) = \rho$ implique $\int_{\mathcal{C}} dk g_1(k) = 0$. Pour déterminer $R(k, s)$, il suffit de choisir un chemin quelconque qui lie les extrémités a et b de \mathcal{C} (par exemple un chemin vertical). Comme pour $\psi_K(s)$, l'argument complexe de (7.56) oscille pour $k \sim k'$, et il faut diviser l'intégrale (7.56) suivant deux régimes $|k - k'| > \sqrt{|s|}$, $|k - k'| < \sqrt{|s|}$. On trouve

$$R(k, s) = -\frac{1}{2} \frac{(1+k)^2(k+2\rho)}{\sqrt{k^2+4\rho(1+k)}} s^2 + \mathcal{O}(s^3) \quad (7.57)$$

ce qui justifie le développement $g = g_0 + |s|g_1$. D'après (7.55), l'équation vérifiée par g_1 s'écrit

$$\phi_1(k) \equiv \frac{1}{4} \frac{k+2\rho}{\sqrt{k^2+4\rho(1+k)}} = \mathcal{P} \int_{\mathcal{C}} dk' \frac{g_1(k')}{k' - k} \quad (7.58)$$

mais il est maintenant nécessaire de considérer la solution non-bornée, qui s'écrit [101, paragraphe 89]

$$g_1(k) = -\frac{1}{\pi^2} \frac{1}{\sqrt{(k-a)(k-b)}} \left[C + \int_{\mathcal{C}} dk' \sqrt{(k'-a)(k'-b)} \frac{\phi_1(k')}{k' - k} \right] \quad (7.59)$$

La constante C est choisie de manière à vérifier $\int_{\mathcal{C}} dk g_1(k) = 0$ (ce qui donne $C = 0$) et on trouve

$$g_1(k) = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{(k-a)(k-b)}} \left[2i \sin 2\theta + (1+k+\cos 2\theta) \ln \left(-\frac{k-a}{k-b} \right) \right] \quad (7.60)$$

Insérant cette expression dans

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = -2\rho + \int_{\mathcal{C}} dk \left[e^{-s} e^{-sk} + e^s e^{sk} \right] g(k) \quad (7.61)$$

on arrive finalement au développement

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = s^2 \rho(1-\rho) + \frac{4}{3\pi} [\rho(1-\rho)]^{3/2} |s|^3 + \mathcal{O}(s^4) \quad (7.62)$$

En utilisant l'algorithme exposé au chapitre 3, on obtient des résultats numériques en accord le terme en $|s|^3$ (figure 7.4).

7.2.6 Valeurs extrêmes de s pour K et Q

Nous commençons par l'étude de $\psi_K(s)$. Dans la limite $s \rightarrow \infty$ ($z \rightarrow 0$), les histoires favorisées sont celles qui engendrent un nombre d'événements minimal. Ceci se voit facilement par exemple sur l'expression (7.33) de \mathbb{W}_K : le terme diagonal $-r(\mathcal{C})$ de l'opérateur d'évolution domine, tandis que le terme non diagonal, proportionnel à z , ne tient lieu que de perturbation. Pour $z = 0$, l'état propre associé à la valeur propre maximale est celui qui minimise $r(\mathcal{C})$. Il correspond à la configuration (dégénérée L fois) où toutes les particules sont rassemblées en un unique amas. Il existe deux manières de sortir de cette configuration, en bougeant les particules extrêmes, ce qui donne $\lim_{s \rightarrow \infty} \psi_K(s) = -2$. Le terme suivant est obtenu

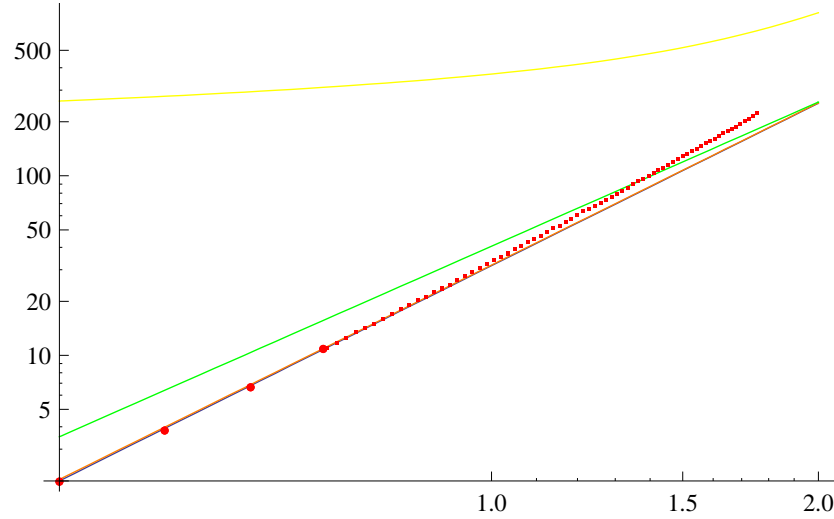


FIG. 7.4 – Tracé de $\psi_Q(s)/(Ls^2) - \rho(1 - \rho)$ en coordonnées logarithmiques. Les points rouges sont obtenus numériquement en utilisant la procédure exposée au chapitre 3 ($L = 600$, $\rho = 1/2$). La ligne bleue correspond au développement limité (7.43), exact à la limite $L \rightarrow \infty$ et pour $s \ll 1$. La ligne verte au terme en $|s|^{8/3}$ du développement (7.31) que l'on obtiendrait en utilisant aveuglément le résultat de Kim. La courbe jaune est le développement pour $|s| \gg 1$, cf. paragraphe suivant.

en effectuant une perturbation autour de cet état (par exemple en adaptant la théorie de perturbation markovienne de l'annexe H). On obtient

$$\psi_K(s) \sim -2 + e^{-2s} + \mathcal{O}(e^{-3s}) \quad \text{pour } s \gg 1 \quad (7.63)$$

Cette limite correspond au régime où K/t est de l'ordre unité.

Dans la limite opposée ($s \rightarrow -\infty$), c'est le terme non diagonal qui domine \mathbb{W}_K et les configurations favorisées sont celles qui donnent le maximum d'événements. Dans ce régime, il est utile de transformer l'expression (7.33) de l'opérateur d'évolution en un opérateur décrivant des fermions en faible interaction, au moyen d'une transformation de Jordan-Wigner [83]. L'opérateur $c_i = \sigma_i^- \prod_{j \leq i-1} (-1)^{n_j}$ et son adjoint sont des opérateurs de création/annihilation fermioniques. L'opérateur nombre d'occupation s'écrit $\hat{n}_j = (1 + \sigma_j^z)/2 = c_i^\dagger c_i$. En passant en coordonnées de Fourier spatiales, (7.33) s'écrit :

$$-\mathbb{W}_K(s) = -2 \sum_i \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2}\right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2}\right) + L \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q \quad (7.64)$$

avec $\varepsilon_q \equiv -2e^{-s} \cos q$, et c_q est la transformée de Fourier de c_i . Dans la limite $s \rightarrow -\infty$, le dernier terme domine. Il correspond au hamiltonien d'un système de N fermions libres, d'énergie $\varepsilon_q = -2e^{-s} \cos q$ dans l'espace de Fourier. Dans l'état fondamental, ceux-ci s'empilent sur les N niveaux d'énergie $\varepsilon_q = -2e^{-s} \cos q$ les plus bas : $|q| \leq \kappa \equiv \pi\rho$. À la limite $L \rightarrow \infty$,

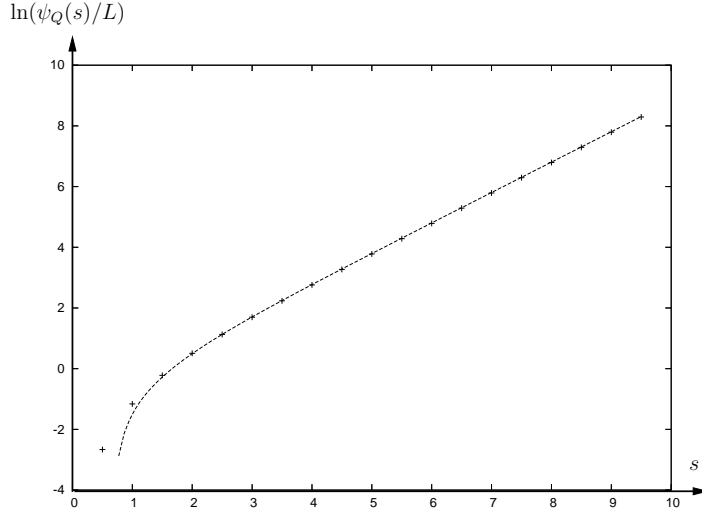


FIG. 7.5 – Tracé de $\psi_K(s)/L$ pour $s > 0$ en unités logarithmiques. La ligne pointillée correspond au développement limité (7.67), valable pour $s \gg 1$. Les points sont obtenus numériquement en utilisant la procédure exposée au chapitre 3 ($L = 200$, $\rho = 1/2$).

les modes de Fourier deviennent continus et une théorie de perturbation donne au premier ordre

$$\psi_K(s) = -2L e^{-s} \int_{-\kappa}^{\kappa} \frac{dq}{2\pi} \cos q - \left\langle 2 \sum_i (n_i - \frac{1}{2})(n_{i+1} - \frac{1}{2}) \right\rangle \quad (7.65)$$

où les crochets $\langle \dots \rangle$ désignent la valeur moyenne dans l'état fondamental de $\sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q$. On obtient

$$\frac{1}{L} \psi_K(s) = 2e^{-s} \frac{\sin \pi \rho}{\pi} - 2\rho(1 - \rho) - 2 \frac{\sin^2(\pi \rho)}{\pi^2} + \mathcal{O}(e^s) \quad \text{pour } s \rightarrow -\infty \quad (7.66)$$

Pour les fluctuations du courant, les deux régimes $s \rightarrow \infty$ et $s \rightarrow -\infty$ correspondent à des histoires avec un courant maximal. En appliquant la méthode précédente, on trouve

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = 2 \cosh s \frac{\sin \pi \rho}{\pi} - 2\rho(1 - \rho) - 2 \frac{\sin^2(\pi \rho)}{\pi^2} + \mathcal{O}(e^{-|s|}) \quad \text{pour } |s| \gg 1 \quad (7.67)$$

À nouveau, le résultat est en accord avec les résultats numériques de simulations effectuées avec l'algorithme présenté au chapitre 3 (figure 7.5).

7.3 Approche de l'hydrodynamique fluctuante

7.3.1 Introduction

Le processus d'exclusion est décrit [122] à la limite macroscopique par sa densité locale de particules $\rho(x, t)$, qui obéit à l'équation de Langevin

$$\partial_t \rho(x, t) = -\partial_x j(x, t), \quad j(x, t) = -\partial_x \rho + \xi(x, t) \quad (7.68)$$

avec un bruit blanc gaussien de corrélations

$$\langle \xi(x, t) \xi(x', t') \rangle = 2\rho(x, t)(1 - \rho(x, t)) \delta(x - x') \delta(t - t') . \quad (7.69)$$

Dans l'état stationnaire, cette description du SEP dans le cadre de l'hydrodynamique fluctuante permet par exemple en conditions aux limites ouvertes de déterminer les corrélations à longue portée créées par un gradient de potentiel chimique [122]. Dans l'état- s associé au courant de particules Q entrant dans le système, elle redonne également le principe d'additivité [14, 15, 16, 19].

En conditions aux limites périodiques, elle permet de retrouver les fluctuations gaussiennes du courant (*cf.* par exemple [19] dans le cadre du principe d'additivité) :

$$\psi_Q(s) = s^2 \rho(1 - \rho) \quad (7.70)$$

pour un profil optimal stationnaire plat.

Nous montrons dans cette partie que l'analyse des *fluctuations* de ce profil permet, à la limite thermodynamique, de retrouver les cumulants d'ordre supérieur du courant (éq. 7.26), comme du nombre d'événements (éq. 7.23). Pour un certain régime de s , on obtient en outre le comportement d'échelle (7.43) de $\psi_K(s)$.

7.3.2 Fluctuations du nombre d'événements K

Le nombre d'événements K s'écrit, à l'échelle macroscopique

$$K(t) = 2 \int_0^t dt' \int_0^L dx \rho(x, t')(1 - \rho(x, t')) \quad (7.71)$$

On s'intéresse aux fluctuations du profil de densité $\rho(x, t)$ autour de sa moyenne $\rho = N/L$:

$$\phi(x, t) = \rho(x, t) - \rho \quad (7.72)$$

Par exemple, le nombre d'événements prend la forme

$$K(t) = 2\rho(1 - \rho)Lt - 2 \int_0^L dx dt \phi^2 \quad (7.73)$$

On suppose que l'on décrit un régime où le profil reste faiblement fluctuant autour de sa moyenne ($\phi \ll \rho$). En utilisant les techniques habituelles pour passer d'une équation de Langevin à une théorie de champ [6, 41, 79, 80], la fonction génératrice $\langle e^{-sK} \rangle$ s'écrit comme

$$\langle e^{-sK} \rangle = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S[\bar{\phi}, \phi, s; t]} . \quad (7.74)$$

L'action $S[\bar{\phi}, \phi, s; t]$ s'écrit

$$S[\bar{\phi}, \phi, s; t] = -2s\rho(1 - \rho)Lt + \int dx dt \left\{ \bar{\phi}(\partial_t - \partial_x^2)\phi - \rho(1 - \rho)(\partial_x \bar{\phi})^2 - 2s\phi^2 \right\} \quad (7.75)$$

On retrouve l'action d'Edwards-Wilkinson (EW) [46] qui décrit les fluctuations du SEP [122], à laquelle s'ajoutent deux termes supplémentaires dépendants de s (on trouvera au paragraphe 8.2.1 d'autres exemples d'actions modifiées par s). Le terme linéaire en s et déterministe correspond à la valeur moyenne de K : $\langle K \rangle = 2L\rho(1 - \rho)t$. Le terme en $s\phi^2$ rend compte des fluctuations de K autour de sa moyenne. Remarquons que si l'on intègre sur le champ $\bar{\phi}$, on retrouve la formulation² de l'hydrodynamique fluctuante utilisée par Bertini *et al.* [14, 15, 16], Bodineau et Derrida [19, 20]. De manière générale, la dynamique à s non nul est décrite par une action quadratique, ce qui permet d'obtenir directement la fonction $\psi_K(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \langle e^{-sK} \rangle$:

$$\psi_K(s) + s \frac{\langle K \rangle}{t} = \frac{1}{2}L \int \frac{dq}{2\pi} \left[q^2 - \underbrace{\sqrt{q^2(q^2 - 8\rho(1 - \rho)s)}}_{\Omega_q(s)} - 4s\rho(1 - \rho) \right] \quad (7.76)$$

L'intégrale (7.76), définie seulement pour $s < 0$, se calcule et donne

$$\frac{1}{L}\psi_K(s) = -2s\rho(1 - \rho) + \frac{2^{7/2}}{3\pi}[\rho(1 - \rho)]^{3/2}(-s)^{3/2} \quad (7.77)$$

Ce résultat concorde exactement (préfacteur compris) avec les deux premiers termes trouvés au moyen l'Ansatz de Bethe (paragraphe 7.2.4 et annexe I). L'absence de terme d'ordre supérieur en s vient du fait que les fluctuations ne sont décrites que de manière minimale par l'hydrodynamique fluctuante – par un bruit gaussien. Enfin, pour $s > 0$, l'approche exposée ici n'est pas utilisable. Nous ne disposons dans ce régime que d'indications numériques montrant que des configurations non uniformes entrent en jeu.

L'action étant gaussienne, on peut également déterminer la fonction de corrélation dans l'état- s , selon :

$$C(r = xL) - \rho^2 = \frac{1}{2}\rho(1 - \rho) \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqr} \frac{q^2 - \Omega_q(s)}{\Omega_q(s)} \quad (7.78)$$

On obtient l'expression suivante

$$\begin{aligned} C(x) - \rho^2 &= [\rho(1 - \rho)]^{3/2} \sqrt{-2s} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{q^2 - \sqrt{q^2(q^2 + 1)}}{\sqrt{q^2(q^2 + 1)}} e^{iqx\sqrt{-8\rho(1 - \rho)sL^2}} \\ &= \frac{1}{2\pi}\rho(1 - \rho) \frac{\sqrt{-8u}}{L} [-2 + \pi I_1(\sqrt{-8ux}) - \pi L_1(\sqrt{-8ux})] \\ &= -\frac{1}{2\pi}\rho(1 - \rho) \frac{1}{\sqrt{-8uL}} \frac{1}{x^2} \left[1 + \frac{3}{(\sqrt{-8ux})^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{u^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (7.79)$$

où $u = L^2\rho(1 - \rho)s$ et I_1 et L_1 sont respectivement une fonction de Bessel et une fonction de Struve modifiées.

²À la Onsager-Machlup [104, 127]. Remarquons aussi qu'on peut obtenir l'action modifiée par s (7.75) à partir de la dynamique microscopique du SEP et du formalisme de Doi et Peliti [42, 105] pour le passage d'un opérateur d'évolution à une théorie de champ (*cf.* également le paragraphe 8.2.5).

7.3.3 Effets de taille finie ; fonction d'échelle pour $\psi_K(s)$

Pour tenir compte des effets de taille finie, il suffit de poser $q = \frac{2n\pi}{L}$ et de remplacer les sommes continues $\int \frac{dq}{2\pi}$ par leur version discrète $\frac{1}{L} \sum_n$, qui reflète la répartition discrète des modes de Fourier. En particulier,

$$\psi_K(s) = -2s\rho(1-\rho)L + \frac{2\pi^2}{L^2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[n^2 - \sqrt{n^2(n^2 - 2s\rho(1-\rho)/\pi^2)} - \frac{1}{\pi} s\rho(1-\rho)L^2 \right] \quad (7.80)$$

On voit apparaître une fonction d'échelle \mathcal{F} de la variable $u = L^2\rho(1-\rho)s$, telle que les fluctuations de K se mettent sous la forme

$$\psi_K(s) + 2L\rho(1-\rho)s = L^{-2}\mathcal{F}(u) \quad (7.81)$$

Les premiers termes du développement de $\mathcal{F}(u)$ autour de 0 redonnent exactement les termes obtenus par le calcul perturbatif du paragraphe 7.2.1

$$\mathcal{F}(u) = \frac{1}{3}u^2 + \frac{1}{45}u^3 + \frac{1}{378}u^4 + \frac{1}{2700}u^5 + \dots \quad (7.82)$$

Son terme général s'écrit, d'après (7.80)

$$\mathcal{F}(u) = \sum_{k \geq 2} \frac{(-2u)^k B_{2k-2}}{\Gamma(k)\Gamma(k+1)} \quad (7.83)$$

où les B_k sont les nombres de Bernoulli. Cette série a pour rayon de convergence $\pi^2/2$ (ce qui apparaît déjà dans l'éq. 7.80). La fonction $\mathcal{F}(u)$ est l'analogue de la fonction universelle déterminée par Derrida et Lebowitz [34] pour le TASEP. En reconnaissant une convolution, on peut la prolonger analytiquement :

$$\mathcal{F}(u) = \begin{cases} 2 \int_0^u dx \left[1 - \frac{1}{\pi} \int_0^1 dy \frac{\sqrt{2x} \cot \sqrt{2xy}}{\sqrt{1-y}} \right] & \text{pour } 0 < u < \frac{\pi^2}{2} \\ 2 \int_0^u dx \left[1 - \frac{1}{\pi} \int_0^1 dy \frac{\sqrt{-2x} \coth \sqrt{-2xy}}{\sqrt{1-y}} \right] & \text{pour } u < 0 \end{cases} \quad (7.84)$$

Dans la limite $u \rightarrow \infty$, on retrouve à nouveau (7.77). La fonction de corrélation dans l'état- s $C(r) = \langle n_i n_{i+r} \rangle_s$ se détermine en passant aux modes de Fourier discrets dans l'expression (7.78), qui se transforme en

$$C(r = Lx) - \rho^2 = \frac{1}{2}\rho(1-\rho) \sum_n e^{2i\pi xn} \left[\frac{n}{\sqrt{n^2 - 2u/\pi^2}} - 1 \right] \quad (7.85)$$

En utilisant les sommes

$$\sum_{n \geq 1} \frac{\cos 2\pi nx}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}(1 - 6x(1-x)), \quad \sum_{n \geq 1} \frac{\cos 2\pi nx}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}(1 - 30x^2(1-x)^2) \quad (7.86)$$

$$\sum_{n \geq 1} \frac{\cos 2\pi nx}{n^6} = \frac{\pi^6}{945}(1 - 21x^2(1-x)^2(1 + 2x(1-x))) \quad (7.87)$$

on voit que les premiers termes du développement en puissances de u redonnent exactement les corrélations (7.24) obtenues par la théorie de perturbation à la limite des grands systèmes

$$C(r = Lx) = \rho^2 + \frac{1}{L} \left[u \left(\frac{1}{6} - x(1-x) \right) + \frac{1}{3} u^2 \left(\frac{1}{30} - x^2(1-x)^2 \right) + \frac{1}{756} u^3 (1 - 21x^2(1-x)^2(1 + 2x(1-x))) \right] \quad (7.88)$$

7.3.4 Fonction d'échelle pour $\psi_Q(s)$

L'action est maintenant définie par

$$\langle e^{-sQ} \rangle = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S[\bar{\phi}, \phi, s; t]} . \quad (7.89)$$

et s'écrit

$$S[\bar{\phi}, \phi, s; t] = s^2 \rho(1-\rho) L t + \int dx dt \left\{ \bar{\phi}(\partial_t - \partial_x^2) \phi - \rho(1-\rho)(\partial_x \bar{\phi})^2 + s^2 \phi^2 + 2s(\partial_x \phi) \phi^2 \right\} \quad (7.90)$$

Elle est semblable à l'action (7.75) pour K , sa partie quadratique se retrouvant en effectuant $s \mapsto -\frac{1}{2}s^2$. En revanche, un terme supplémentaire apparaît, cubique (de type KPZ).

Nous restreignons d'abord notre étude aux valeurs de s pour lesquelles ce terme cubique n'est pas pertinent. La fonction $\psi_Q(s)$ est à nouveau donnée par une intégrale

$$\psi_Q(s) - \frac{1}{2} s^2 \frac{\langle Q^2 \rangle_c}{t} = \frac{1}{2} L \int \frac{dq}{2\pi} \left[q^2 - \sqrt{q^2(q^2 + 4\rho(1-\rho)s^2)} + 2s^2 \rho(1-\rho) \right] \quad (7.91)$$

En taille finie, la somme est discrète :

$$\psi_Q(s) = s^2 \rho(1-\rho) L + \frac{2\pi^2}{L^2} \sum_n \left[n^2 - \sqrt{n^2(n^2 + s^2 \rho(1-\rho)/\pi^2)} + \frac{1}{2\pi} s^2 \rho(1-\rho) L^2 \right] \quad (7.92)$$

On voit apparaître la même fonction d'échelle \mathcal{F} que pour $\psi_K(s)$, la variable d'échelle étant $v = -\frac{1}{2} L^2 \rho(1-\rho) s^2$. Les fluctuations de Q sont données par

$$\psi_Q(s) - L \rho(1-\rho) s^2 = L^{-2} \mathcal{F}(v) \quad (7.93)$$

Les premiers termes du développement de $\mathcal{F}(v)$ autour de 0 redonnent exactement les termes obtenus par le calcul perturbatif du paragraphe 7.2.2. Comme pour le nombre d'événements, on aboutit au résultat remarquable suivant : tous les cumulants de Q s'obtiennent à la limite thermodynamique par une théorie gaussienne. Explicitement :

$$\psi_Q(s) - \rho(1-\rho) L s^2 = \frac{1}{12} L^2 [\rho(1-\rho)]^2 s^4 - \frac{1}{360} L^4 [\rho(1-\rho)]^3 s^6 + \dots \quad (7.94)$$

On peut conjecturer que dans la limite $v \rightarrow \infty$, le terme cubique de l'action reste toujours négligeable. Si c'est bien le cas, on obtient grâce à (7.84) :

$$\frac{1}{L} \psi_Q(s) = s^2 \rho(1-\rho) + \frac{4}{3\pi} [\rho(1-\rho)]^{3/2} |s|^3 \quad (7.95)$$

L'intégrale (7.91) donne aussi ce résultat, qui est identique à celui obtenu par l'Ansatz de Bethe (7.62).

7.4 Résumé

En guise de conclusion, on peut résumer les résultats obtenus dans ce chapitre, qui illustrent la diversité des régimes scrutés par $\psi_K(s)$ et $\psi_Q(s)$.

• Nombre d'événements K pour le SEP

$$\begin{aligned}
 s &\gg 1 & \psi_K(s) &\sim -2 + e^{-2s} + \mathcal{O}(e^{-3s}) & (\text{perturbation}) \\
 |s| &\ll L^{-2} & \psi_K(s) + 2\rho(1-\rho)Ls &\sim L^2 s^2 & (\text{EW, perturbation}) \\
 -1 &\ll s \ll -L^{-2} & \psi_K(s) + 2\rho(1-\rho)Ls &\sim L(-s)^{\frac{3}{2}} & (\text{EW, Bethe}) \\
 s &\ll -1 & \frac{1}{L}\psi_K(s) &\sim 2e^{-s} \frac{\sin \pi \rho}{\pi} & (\text{Fermions libres})
 \end{aligned}$$

Fonction d'échelle dans le régime $|s| \ll L^{-1}$, pour L grand :

$$\psi_K(s) + 2\rho(1-\rho)Ls = L^{-2}\mathcal{F}(u) \quad \text{où } u = L^2\rho(1-\rho)s$$

avec $\mathcal{F}(u) = \frac{1}{3}u^2 + \frac{1}{45}u^3 + \frac{1}{378}u^4 + \frac{1}{2700}u^5 + \dots = \sum_{k \geq 2} \frac{(-2u)^k B_{2k-2}}{\Gamma(k)\Gamma(k+1)}$, qui se prolonge en

$$\mathcal{F}(u) = \begin{cases} 2 \int_0^u dx \left[1 - \frac{1}{\pi} \int_0^1 dy \frac{\sqrt{2x} \cot \sqrt{2xy}}{\sqrt{1-y}} \right] & \text{pour } 0 < u < \frac{\pi^2}{2} \\ 2 \int_0^u dx \left[1 - \frac{1}{\pi} \int_0^1 dy \frac{\sqrt{-2x} \coth \sqrt{-2xy}}{\sqrt{1-y}} \right] & \text{pour } u < 0 \end{cases}$$

La fonction de corrélation $C(r) = \langle n_i n_{i+r} \rangle$ s'y écrit

$$C(r = Lx) - \rho^2 = \frac{1}{2}\rho(1-\rho) \sum_n e^{2i\pi x n} \left[\frac{n}{\sqrt{n^2 - 2u/\pi^2}} - 1 \right] \quad (\text{EW})$$

Il existe à nouveau une fonction d'échelle. Les comportements asymptotiques sont :

$$\begin{aligned}
 u \rightarrow 0 \quad C(r = Lx) - \rho^2 &= \frac{1}{L} \left[u \left(\frac{1}{6} - x(1-x) \right) + \frac{1}{3}u^2 \left(\frac{1}{30} - x^2(1-x)^2 \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{189}u^3(1-21x^2(1-x)^2(1+2x(1-x))) \right] \quad (\text{EW, perturbation}) \\
 u \rightarrow \infty \quad C(r = Lx) - \rho^2 &= -\frac{1}{2\pi}\rho(1-\rho) \frac{1}{\sqrt{-8uL}} \frac{1}{x^2} \left[1 + \frac{3}{(\sqrt{-8uL})^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{u^2}\right) \right] \quad (\text{EW})
 \end{aligned}$$

• Courant total Q pour le SEP

Comportements asymptotiques :

$$\begin{aligned}
 |s| &\ll L^{-1} & \psi_Q(s) - \rho(1-\rho)Ls^2 &\sim L^2 s^4 & (\text{EW, perturbation}) \\
 L^{-1} &\ll |s| \ll 1 & \psi_Q(s) - \rho(1-\rho)Ls^2 &\sim L|s|^3 & (\text{Bethe, EW}) \\
 |s| &\gg 1 & \frac{1}{L}\psi_Q(s) &\sim e^{|s|} \frac{\sin \pi \rho}{\pi} & (\text{Fermions libres})
 \end{aligned}$$

Le régime d'échelle est décrit grâce à la même fonction \mathcal{F} , dans sa branche négative :

$$\psi_Q(s) - \rho(1-\rho)Ls^2 = L^{-2}\mathcal{F}(v) \quad \text{où } v = -\frac{1}{2}L^2\rho(1-\rho)s^2$$

Chapitre 8

Systèmes superdiffusifs et fluctuations de courant

8.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons et mettons en perspective les résultats de la publication **P4**. Les résultats ont été obtenus en collaboration avec Frédéric van Wijland et uwe Täuber.

8.1.1 Motivations

Nous examinons dans ce chapitre les fluctuations du courant total Q traversant un système de taille L en dimension d , constitué de particules en interaction sur un réseau. Le système est éventuellement soumis à un champ extérieur qui le plonge hors d'équilibre. Nous nous intéressons au comportement de l'énergie libre dynamique $\psi_Q(s, L)$ à la limite macroscopique, le pas du réseau tendant vers 0 et taille du système vers l'infini (la densité de particules étant fixée). Outre ses propriétés de symétrie, la fonction $\psi_Q(s, L)$ donne des renseignements sur la nature des fluctuations du courant. Dans un système de particules indépendantes et sans interaction, $\psi_Q(s, L)$ est simplement proportionnelle au nombre de particules dans le système : elle prend la forme d'échelle

$$\psi_Q^{\text{indép}}(s, L) = L^d (B_1 s + B_2 s^2 + \dots) , \quad (8.1)$$

En d'autres termes, tous les cumulants du courant ($\langle Q \rangle = -L^d B_1$, $\langle Q^2 \rangle_c = \frac{1}{2} L^d B_2$, ...) sont proportionnels au volume L^d . Lorsque les particules sont en interaction, on peut difficilement prédire le comportement en L de $\psi_Q(s, L)$. Sur certains exemples particuliers, à l'équilibre [87, 93] ou hors d'équilibre [34, 35], on sait que ces interactions se traduisent par l'apparition de puissances non entières de $|s|$ dans le développement de $L^{-d} \psi_Q(s, L)$ au voisinage de $s = 0$, à la limite $L \rightarrow \infty$. Ce comportement non analytique en $s = 0$ reflète l'existence d'un cumulant $\langle Q^k \rangle_c$ du courant qui croît “anormalement” avec L^d dans la limite $L \rightarrow \infty$. Dans le processus d'exclusion totalement asymétrique (TASEP) en dimension 1, la fonction de

grandes déviations [34, 35] s'écrit (pour grand L , la densité ρ étant fixée, et en conditions aux limites périodiques)

$$\frac{1}{L}\psi_Q^{\text{TASEP}}(s) = -\rho(1-\rho)s + \frac{(3\pi)^{\frac{2}{3}}}{5}[\rho(1-\rho)]^{\frac{4}{3}}|s|^{\frac{5}{3}} + \dots \quad \text{pour } s < 0, \quad (8.2)$$

ce qui implique que la variance de Q augmente plus vite que la taille du système. Dans le processus d'exclusion symétrique (SEP) on a [87, 93]

$$\frac{1}{L}\psi_Q^{\text{SEP}}(s) = \frac{1}{2}\rho(1-\rho)s^2 + \frac{2^{\frac{1}{3}}(2\pi)^{\frac{2}{3}}}{5}[\rho(1-\rho)]^{\frac{4}{3}}|s|^{\frac{8}{3}} + \dots \quad \text{pour } s < 0. \quad (8.3)$$

Ce comportement anormal de la fonction de grandes déviations arrive un rang plus loin que pour le TASEP – il provient de détails plus fins. D'une manière générale, on s'attend à ce que les exposants qui apparaissent dans (8.2) et (8.3) soient universels (pour des modèles dans une même classe), les préfacteurs de $|s|^{\frac{5}{3}}$, $|s|^{\frac{8}{3}}$, ... dépendant des détails du modèle.

Dans les systèmes diffusifs de particules en interaction dans un gradient de potentiel chimique, Bodineau and Derrida [18, 19, 20], ainsi que Bertini, De Sole, Gabrielli, Jona-Lasinio, et Landim [14, 15, 16], ont trouvé une méthode générale pour déterminer la fonction de grandes déviations du courant (*cf.* également la partie 5.3). Cette approche n'est cependant valide que pour les systèmes *normalement* diffusifs. Dans notre contexte cela revient à demander qu'à la limite continue, l'échelle de temps τ et le pas du réseau a tendent vers 0 selon $\tau \propto a^2$ (*i.e.* suivent la limite hydrodynamique). Il existe bien sûr de nombreuses situations physiques où la diffusion est *anormale*, c'est-à-dire où a et τ s'échellent suivant $\tau \sim a^z$ avec un "exposant dynamique" $z \neq 2$. Le TASEP appartient à la classe KPZ [86] pour laquelle $z = \frac{3}{2}$. D'autre part, l'approche de l'hydrodynamique fluctuante n'est valide que dans l'étude des faibles fluctuations de courant, comme on l'a vu au chapitre 7.

Dans **P4**, nous avons étudié quelques exemples superdiffusifs ($z < 2$). Nous utilisons des méthodes de renormalisation (RG) [127], particulièrement adaptées à la limite continue. Elles permettent en outre de s'affranchir des techniques assez spécifiques des systèmes d'exclusion (du type SEP, TASEP).

8.1.2 Systèmes étudiés

Nous examinons les propriétés de systèmes constitués, à l'échelle microscopique, de particules soumises à une force dans une direction spatiale particulière (notée ' \parallel ' dans ce qui suit). Nous adoptons une description mésoscopique, le système étant décrit par une densité locale de particules $\rho(\mathbf{x}, t)$. La conservation du nombre de particules se traduit sous la forme d'une équation de "continuité" sur ρ

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad (8.4)$$

Le courant de particules \mathbf{j} dépend du champ extérieur et de la nature des interactions entre les particules. Il contient également un terme de bruit qui représente les fluctuations microscopiques à l'échelle mésoscopique. L'équation (8.4) prend donc la forme d'une

équation de Langevin. Dans l'ensemble des situations considérées par la suite, la densité $\rho(x, t) = \rho_0 + \phi(x, t)$ fluctue faiblement autour de sa valeur moyenne ρ_0 . Le courant se décompose également en une partie constante \mathbf{j}_0 et une partie fluctuante $\mathbf{j} - \mathbf{j}_0$.

Le premier modèle considéré représente à l'échelle mésoscopique un ensemble de particules qui s'excluent mutuellement [81, 94], soumises à un champ extérieur qui crée un courant dans la direction \parallel . En suivant [9, 81], le courant de particules s'écrit, en fonction de la fluctuation de densité $\phi(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathbf{j}_\perp - \mathbf{j}_{\perp 0} = -D \nabla_\perp \phi + \boldsymbol{\eta}_\perp, \quad (8.5)$$

$$j_\parallel - j_{\parallel 0} = -\lambda D \nabla_\parallel \phi - \frac{Dg}{2} \phi^2 + \eta_\parallel. \quad (8.6)$$

Le paramètre g rend compte de l'interaction répulsive entre les particules. Le paramètre D (resp. λD) représente la constante de diffusion effective dans la direction \perp (resp. \parallel). Le bruit $\boldsymbol{\eta}$ traduit les fluctuations microscopiques. C'est un bruit blanc gaussien de corrélations

$$\langle \eta_{\perp i}(\mathbf{x}, t) \eta_{\perp j}(\mathbf{y}, t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta(t - t'), \quad (8.7)$$

$$\langle \eta_\parallel(\mathbf{x}, t) \eta_\parallel(\mathbf{y}, t') \rangle = 2D\sigma \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta(t - t'). \quad (8.8)$$

En présence d'un champ, et en conditions aux limites périodiques, les équations (8.4-8.8) décrivent un système hors d'équilibre, parcouru dans l'état stationnaire par un courant permanent dans la direction longitudinale \parallel . En particulier, les constantes λ et σ dans (8.6) et (8.8) ne sont pas nécessairement égales. Une étude détaillée de ses propriétés d'échelle à la limite continue est effectuée dans [81, 127]. En dimension 1, l'exposant dynamique vaut $z = 3/2$: la limite continue est la même que pour l'équation de Burgers bruitée [54]. En dimension 2, on obtient $z_\parallel = 2$, avec des corrections logarithmiques dans la direction du champ, tandis que la diffusion est normale dans la direction transverse ($z_\perp = 2$).

Le second modèle que nous considérons est en quelque sorte le modèle "standard" de système diffusif en champ présentant une transition de phase continue dans un état stationnaire hors d'équilibre [115, 116]. Dans la direction \parallel , le courant prend la même forme que (8.6). Le courant transverse est similaire à celui du modèle de Ginzburg-Landau dynamique avec un paramètre d'ordre conservé [127] :

$$j_\parallel - j_{\parallel 0} = -\lambda D \nabla_\parallel \phi - \frac{Dg}{2} \phi^2 + \eta_\parallel \quad (8.9)$$

$$\mathbf{j}_\perp - \mathbf{j}_{\perp 0} = -D \nabla_\perp \left(r - \nabla_\perp^2 + \frac{u}{6} \phi^2 \right) \phi + \boldsymbol{\eta}_\perp, \quad (8.10)$$

Les corrélations du bruit sont les mêmes que précédemment. Le système est critique en $r = 0$ (dans l'approximation de champ moyen). En l'absence de champ ($g = 0$), ce modèle décrit la transition de phase du modèle d'Ising muni de la dynamique de Kawasaki (modèle B, [71]). En présence du champ ($g \neq 0$), le système change de classe d'universalité : u devient non pertinent pour les propriétés critiques du modèle, qui sont entièrement gouvernées par le terme non linéaire en g [115]. Le système est superdiffusif dans la direction du champ ($z_\parallel = 12/(11 - d)$)

en dimension $d < 5$, avec à nouveau des corrections logarithmiques exactement à $d_c = 5$. La diffusion est normale dans la direction transverse ($z_\perp = 2$).

Nous considérons enfin un système de particules qui diffusent dans un champ de vitesse désordonné, suivant Honkonen [75]. Au niveau mésoscopique, la diffusion s'effectue dans un champ aléatoire $\psi(\mathbf{x}_\perp)$, dirigé selon \mathbf{e}_\parallel . En moyenne, le courant de particules est nul ($\mathbf{j}_0 = \mathbf{0}$) et sa partie fluctuante s'écrit

$$\mathbf{j}_\perp = -D_\perp \nabla_\perp \phi + \boldsymbol{\eta}_\perp , \quad (8.11)$$

$$j_\parallel = -D_\parallel \nabla_\parallel \phi - \psi \phi + \eta_\parallel . \quad (8.12)$$

Les corrélations du bruit assurent que les secteurs transverse et longitudinal sont à l'équilibre.

$$\langle \eta_{\perp,i}(\mathbf{x}, t) \eta_{\perp,j}(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_\perp \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) , \quad (8.13)$$

$$\langle \eta_\parallel(\mathbf{x}, t) \eta_\parallel(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D_\parallel \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) . \quad (8.14)$$

Suivant la distribution des corrélations spatiales du champ aléatoire $\psi(\mathbf{x}_\perp) \mathbf{e}_\parallel$, les particules adoptent un comportement subdiffusif ou superdiffusif [8, 75]. Nous nous intéressons ici au cas d'un champ sans corrélation spatiale, de distribution gaussienne, avec

$$\langle \psi(\mathbf{x}_\perp, t) \psi(\mathbf{x}'_\perp, t') \rangle = \lambda \delta(\mathbf{x}'_\perp - \mathbf{x}_\perp) \delta(t' - t) \quad (8.15)$$

Les particules sont superdiffusives dans la direction longitudinale ($z_\parallel = 4/(5-d)$) en dimension $d < d_c = 3$ [75]. Remarquons ici que le comportement superdiffusif provient de la marche aléatoire à l'équilibre de particules dans le champ aléatoire gelé $\psi(\mathbf{x}_\perp) \mathbf{e}_\parallel$, alors que dans les systèmes précédents la diffusion anormale provenait du champ extérieur, qui mène le système hors d'équilibre.

8.2 Fluctuations de courant

8.2.1 Action effective dans l'état- s

Pour chacun des systèmes décrits ci-dessus, nous souhaitons étudier le courant longitudinal total $Q(t)$ qui traverse le système sur une durée t

$$Q(t) = \int_0^t dt' \int d^d x j_\parallel(\mathbf{x}, t') \quad (8.16)$$

La fonction de partition associée s'écrit

$$Z_Q(s, t) = \langle e^{-s Q(t)} \rangle = \left\langle \exp \left[-s \int_0^t dt' \int d^d x j_\parallel(\mathbf{x}, t') \right] \right\rangle . \quad (8.17)$$

C'est la fonction génératrice de ses moments :

$$(-1)^n \frac{d^n Z(s, t)}{ds^n} \Big|_{s=0} = \langle Q(t)^n \rangle . \quad (8.18)$$

En utilisant les techniques habituelles pour passer d'une équation de Langevin à une théorie de champ [6, 41, 79, 80], la fonction de $Z(s, t)$ s'écrit génériquement comme

$$Z_Q(s, t) = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-S[\bar{\phi}, \phi, s; t]} . \quad (8.19)$$

L'action $S[\bar{\phi}, \phi, s; t]$ dépend du paramètre s conjugué à Q et sert de point de départ pour chacun des systèmes étudiés. Elle ne représente pas un processus de Markov qui conserve la probabilité, sauf pour $s = 0$ où l'on retrouve l'action habituelle du système ($Z_Q(s = 0, t) = 1$). La fonction de partition $Z_Q(s, t)$ augmente exponentiellement en temps, et on définit à nouveau $\psi_Q(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln Z_Q(s, t)$. De même qu'au paragraphe 1.4.3, $S[\bar{\phi}, \phi, s; t]$ décrit l'évolution du système pour des histoires conditionnées par la valeur moyenne (sur l'intervalle de temps $[0, t]$) du courant qui a traversé le système sur une durée t .

8.2.2 Particules diffusant dans un champ ; équation de Burgers bruitée

En utilisant la convention de Itô pour le passage de l'équation de Langevin (8.4) à la théorie de champ, on trouve l'action suivante pour le premier système :

$$S[\bar{\phi}, \phi, s; t] = \int d^d x \int_0^t dt' \left[\bar{\phi} \left(\partial_{t'} - D \nabla_{\perp}^2 - D \lambda \nabla_{\parallel}^2 \right) \phi - D (\nabla_{\perp} \bar{\phi})^2 - D \sigma (\nabla_{\parallel} \bar{\phi})^2 \right. \\ \left. - \frac{D s g}{2} \phi^2 + \frac{D g}{2} (\nabla_{\parallel} \bar{\phi}) \phi^2 \right] + s j_0 L^d t - s^2 D \sigma L^d t . \quad (8.20)$$

Par rapport au cas stochastique $S[\bar{\phi}, \phi, s = 0; t]$, cette action possède deux termes déterministes supplémentaires, ainsi qu'un terme quadratique fluctuant. Nous montrons dans **P4** que ce terme n'ajoute pas de contribution divergente aux fonctions de vertex de la théorie stochastique (même si la valeur de ces fonctions dépend maintenant de s). Autrement dit, les propriétés critiques du modèle ne sont pas drastiquement modifiées par les termes supplémentaires en s . Après renormalisation, on trouve que les fluctuations du courant sont normales en dimension d supérieure à la dimension critique du système ($d > 2$). En dessous de la dimension critique $d_c = 2$, on obtient le comportement d'échelle :

$$L^{-d} \psi_Q(s) = -j_0 s + \mathcal{A}_d s^{(d+4)/3} \quad (8.21)$$

Le préfacteur \mathcal{A}_d n'est pas universel, et l'exposant $(d+4)/3$ est exact. On retrouve en dimension 1 l'exposant $5/3$ du TASEP [34, 35] – voir également (8.2). Ce résultat corrobore le fait que l'équation de Burgers bruitée et le TASEP appartiennent à la même classe d'universalité (dynamique). À la dimension critique exactement ($d = 2$), le groupe de renormalisation permet de trouver les corrections à l'exposant 2 de (8.21) :

$$L^{-2} \psi_Q(s) = -j_0 s + \mathcal{A}_2 s^2 (-\ln |s|)^{2/3} . \quad (8.22)$$

De telles corrections logarithmiques sont habituelles à la dimension critique supérieure. Notons qu'elles interviennent ici dans un cadre dynamique. À notre connaissance, le comportement d'échelle (8.22) est le premier résultat exact de ce genre en dimension 2.

8.2.3 Modèle diffusif en champ avec transition continue

Dans ce cas, la dimension critique du système vaut $d_c = 5$ et on obtient (avec $\epsilon = d_c - d$), pour $\epsilon > 0$:

$$L^{-d} \psi_Q(s) = -j_0 s + \mathcal{A}_d s^{2-\epsilon/18} , \quad (8.23)$$

où l'amplitude \mathcal{A}_d n'est pas universelle. L'exposant est ici valide au premier ordre en ϵ . À la dimension critique, les corrections logarithmiques s'écrivent

$$L^{-5} \psi_Q(s) = -j_0 s + \mathcal{A}_5 s^2 (-\ln |s|)^{2/9} . \quad (8.24)$$

8.2.4 Superdiffusion dans un champ de vitesse désordonné

Ce système étant désordonné, précisons avant toute chose à quel niveau intervient la moyenne sur le désordre dans la fonction de grandes déviations du courant. Les caractéristiques physiques des fluctuations de Q sont contenues dans les *cumulants* $\overline{\langle Q(t)^n \rangle_c}$ moyennés sur le désordre. La moyenne sur les histoires (*i.e.* sur le désordre thermique) est notée $\langle \dots \rangle$, tandis que la moyenne sur le champ aléatoire ψ est notée $\overline{\dots}$. Nous cherchons donc à déterminer

$$\psi_Q(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \overline{\ln Z_Q(s, t)} . \quad (8.25)$$

où la fonction de partition dynamique $Z_Q(s, t)$ dépend du désordre. La théorie de champ correspondant à (8.11-8.13) donne Z sous la forme $Z_Q(s, t) = \int \mathcal{D}\bar{\phi} \mathcal{D}\phi e^{-S_\psi[\bar{\phi}, \phi, s; t]}$, où l'action s'écrit

$$\begin{aligned} S_\psi[\bar{\phi}, \phi, s; t] = & -s^2 D_{\parallel} L^d t + \int d^d x \int_0^t dt' \left[\bar{\phi} \left(\partial_{t'} - D_{\perp} \nabla_{\perp}^2 - D_{\parallel} \nabla_{\parallel}^2 - \psi \nabla_{\parallel} \right) \phi \right. \\ & \left. - D_{\perp} (\nabla_{\perp} \bar{\phi})^2 - D_{\parallel} (\nabla_{\parallel} \bar{\phi})^2 - s \psi \phi \right] . \end{aligned} \quad (8.26)$$

L'évaluation de (8.25) peut s'effectuer en utilisant une méthode de répliques. Au dessus de la dimension critique $d_c = 3$, le système possède des fluctuations de courant normales. En dessous de la dimension critique, on trouve le comportement d'échelle

$$L^{-d} \psi_Q(s) = \mathcal{A}_d s^{2-2\epsilon/5} = \mathcal{A}_d s^{2d/5} . \quad (8.27)$$

avec $\epsilon = d_c - d$. Ce résultat implique qu'en taille finie, la variance du courant augmente plus vite que le volume du système, *bien que le système soit à l'équilibre*. Nous ne connaissons pas d'autre système à l'équilibre où cette propriété ait été exhibée. À la dimension critique $d_c = 3$, on obtient la correction logarithmique

$$\psi_Q(s) = \mathcal{A}_3 s^2 (-\ln |s|) . \quad (8.28)$$

qui implique comme précédemment une divergence logarithmique en la taille du système de la variance "volumique" du courant $\frac{1}{L^2 t} \langle Q^3 \rangle_c$, en taille finie.

8.2.5 Autre approche

L'approche développée dans ce chapitre se fonde sur une description phénoménologique des fluctuations thermiques microscopiques, décrites par le bruit blanc gaussien (8.7-8.8). Il est possible de partir directement d'un modèle microscopique dans lequel, comme dans [133], l'équation maîtresse sur $\hat{P}_Q(\mathcal{C}, s, t)$ (cf. éqs. 1.58, 1.59) se traduit exactement sous forme d'une théorie de champ, suivant l'approche de Doi et Peliti [42, 105].

On peut illustrer rapidement cette méthode sur le modèle de Honkonen. On considère des particules indépendantes qui diffusent sur un réseau de pas b dans un champ aléatoire $-\tilde{\psi}(\mathbf{x}_\perp)\mathbf{e}_\parallel$, ce qui signifie que dans la direction \mathbf{e}_\parallel le taux de saut de \mathbf{x} vers $\mathbf{x} \pm b\mathbf{e}_\parallel$ s'écrit $\tilde{D}_\parallel \mp \frac{1}{2}\tilde{\psi}(\mathbf{x}_\perp)$. L'opérateur d'évolution pour $\hat{P}_Q(\mathcal{C}, \tilde{s}, t)$ peut s'écrire en fonction d'opérateurs d'annihilation et de création bosoniques :

$$\mathbb{W}_Q = \tilde{D}_\perp \sum_{\mathbf{x}} a_{\mathbf{x}}^\dagger \Delta_\perp a_{\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{x}, \pm} \left[\tilde{D}_\parallel \mp \frac{1}{2}\tilde{\psi}(\mathbf{x}_\perp) \right] \left(a_{\mathbf{x}}^\dagger - e^{\mp \tilde{s}} a_{\mathbf{x} \pm b\mathbf{e}_\parallel}^\dagger \right) a_{\mathbf{x}} \quad (8.29)$$

La limite continue ($b \rightarrow 0$, $a_{\mathbf{x}} \mapsto \rho(\mathbf{x})$, $a_{\mathbf{x}}^\dagger \mapsto \bar{\rho}(\mathbf{x})$) s'effectue en gardant $D = b^2 \tilde{D}$, $\psi = b\tilde{\psi}$ et $s = b^{-1}\tilde{s}$ fixés. La fonction de partition que l'on cherche à évaluer s'écrit $Z_Q(s, t) = \int \mathcal{D}\bar{\rho} \mathcal{D}\rho e^{-S}$ avec

$$\begin{aligned} S_\psi[\bar{\rho}, \rho] = & \int d^d x dt \left[\bar{\rho}(\partial_t - D_\perp \Delta_\perp - D_\parallel \partial_\parallel^2 - \psi \partial_\parallel) \rho \right] + \frac{1}{2\lambda} \int d^{d-1} x_\perp \psi^2(\mathbf{x}_\perp) \\ & - \int d^d x dt \left[s^2 D_\parallel \bar{\rho} \rho + s \psi \bar{\rho} \rho + 2 D_\parallel s \bar{\rho} \partial_\parallel \rho \right] \end{aligned} \quad (8.30)$$

En effectuant la transformation de Cole-Hopf¹

$$\bar{\rho} = e^{\bar{\phi}} \quad (8.31)$$

$$\rho = e^{-\bar{\phi}} \phi \quad (8.32)$$

on ne retrouve pas tout à fait l'action (8.26), mais

$$\begin{aligned} S_\psi[\bar{\phi}, \phi] = & \frac{1}{2\lambda} \int d^{d-1} x_\perp \psi(\mathbf{x}_\perp)^2 - \int d^d x dt \left[s^2 D_\parallel \phi + s \psi \phi + 2 s D_\parallel \bar{\phi} \partial_\parallel \phi \right] \\ & + \int d^d x dt \left[\bar{\phi}(\partial_t - D_\perp \Delta_\perp - D_\parallel \partial_\parallel^2 - \psi \partial_\parallel) \phi \right. \\ & \left. - D_\perp \phi (\nabla_\perp \bar{\phi})^2 - D_\parallel \phi (\partial_\parallel \bar{\phi})^2 \right] \end{aligned} \quad (8.33)$$

C'est exactement l'action que l'on obtient en revenant à une version fluctuante des corrélateurs du bruit

$$\langle \eta_{\perp, i}(\mathbf{x}, t) \eta_{\perp, j}(\mathbf{x}', t') \rangle = 2 D_\perp \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) \phi(x, t) \quad (8.34)$$

$$\langle \eta_\parallel(\mathbf{x}, t) \eta_\parallel(\mathbf{x}', t') \rangle = 2 D_\parallel \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \delta(t' - t) \phi(x, t) \quad (8.35)$$

¹On consultera [4] pour d'autres liens de cette nature entre l'approche de Doi-Peliti et les équations de Langevin. Remarquons que dans notre contexte, nous établissons ce lien à $s \neq 0$.

Dans la formulation mésoscopique développée au paragraphe précédent, on avait en effet utilisé une version approximée (8.13) de (8.34), valide dans le régime où la densité de particules fluctue peu autour de sa valeur moyenne. Ces deux versions sont physiquement équivalentes à l'échelle macroscopique.

Du point de vue de la théorie des champs, nous allons vérifier qu'il est équivalent d'étudier l'action (dépendante de s) exacte (8.33) ou sa version approximée (8.26). Remarquons tout d'abord que la transformation galiléenne $x_{\parallel} \mapsto x_{\parallel} + 2D_{\parallel}st$ élimine le terme $-2sD_{\parallel}\bar{\phi}\partial_{\parallel}\phi$ de l'action (8.33). De plus, si le système part d'une densité de particule fixée $\phi_0 = L^{-d} \int d^d x \phi(x, 0)$, la conservation du nombre de particules assure que $\int d^d x \phi(x, t)$ reste constant. Le terme $-s^2 D_{\parallel} \int d^d x dt \phi(x, t)$ de l'action prend donc une forme déterministe. Ceci suggère de séparer le champ de densité en sa contribution moyenne ϕ_0 et sa partie fluctuante : $\phi(x, t) \mapsto \phi_0 + \phi(x, t)$. Au total, on arrive à l'expression

$$\begin{aligned} S_{\psi}[\bar{\phi}, \phi] = & -s^2 D_{\parallel} \phi_0 L^d t + \frac{1}{2\lambda} \int d^{d-1} x_{\perp} \psi(\mathbf{x}_{\perp})^2 \\ & + \int d^d x dt \left[\bar{\phi}(\partial_t - D_{\perp} \Delta_{\perp} - D_{\parallel} \partial_{\parallel}^2 - \psi \partial_{\parallel}) \phi - s \psi \phi \right. \\ & \quad - D_{\perp} \phi_0 (\nabla_{\perp} \bar{\phi})^2 - D_{\parallel} \phi_0 (\partial_{\parallel} \bar{\phi})^2 \\ & \quad \left. - D_{\perp} \phi (\nabla_{\perp} \bar{\phi})^2 - D_{\parallel} \phi (\partial_{\parallel} \bar{\phi})^2 \right] \end{aligned} \quad (8.36)$$

Un comptage de puissance montre que les termes $\phi(\nabla_{\perp} \bar{\phi})^2$, $\phi(\partial_{\parallel} \bar{\phi})^2$ sont non pertinents (ce que confirme l'analyse du groupe de renormalisation). Finalement, en redéfinissant λ , ϕ , $\bar{\phi}$ et ψ , on peut poser $\phi_0 = 1$ sans perte de généralité (S_{ψ}/ϕ_0 ne dépend plus de ϕ_0 , comme on l'attend pour des particules indépendantes), et on retrouve finalement la forme (8.26) de l'action.

Pour les autres systèmes étudiés, il est également possible de partir d'une formulation microscopique de la dynamique, par exemple, celle du TASEP ou de l'ASEP, pour retrouver l'action de Burgers (8.20) (modifiée par s) en utilisant le *mapping* sur une théorie de champ de Doi-Peliti associé à des opérateurs bosoniques [132] ou des opérateurs de spin [53].

8.3 Conclusions

Les exemples étudiés illustrent le parallèle entre la thermodynamique d'équilibre et la thermodynamique des histoires exposée dans les chapitres précédents. Nous avons en particulier montré que les outils bien éprouvés dans le cadre statique (groupe de renormalisation, méthodes des répliques) s'adaptent directement à notre approche dynamique, la fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ se déterminant comme une énergie libre statique.

Le résultat obtenu pour les systèmes superdiffusifs est l'existence d'un exposant a qui caractérise la singularité de $\psi_Q(s)$ à la limite macroscopique

$$L^{-d} \psi_Q(s) + j_0 s \sim s^a, \quad \text{avec } 1 < a \leq 2. \quad (8.37)$$

Cette singularité (si $a < 2$) traduit l'existence d'un comportement anormal de la variance du courant en fonction de la taille du système, en taille finie. La divergence apparaît comme conséquence directe de la superdiffusion ($z < 2$) des particules dans le système.

Chapitre 9

Perspectives

9.1 Conclusions

La ligne directrice de cette thèse est la traduction du formalisme thermodynamique de Ruelle dans le cadre des systèmes markoviens en temps continu. Nous avons vu au chapitre 1 que la construction de Boltzmann correspondante, une fois traduite en temps continu, aboutissait à l'étude de fonctions de grandes déviations associées à des observables A extensives en temps. La fonction de partition dynamique de Ruelle trouve notamment une interprétation simple en fonction de la complexité dynamique Q_+ des histoires de configurations. En effectuant le parallèle avec la thermodynamique standard, nous avons montré qu'il est plus facile d'adopter un point de vue canonique, où les histoires sont étudiées à la "température" s (conjuguée à A), définissant la notion d'état- s . Nous avons également été amenés à étudier les singularités de l'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$ associée aux observables de type A . Ces singularités correspondent à une transition de phase dynamique, que l'on peut mettre en évidence en étudiant la valeur moyenne de certaines observables (comme la densité de particules ou l'aimantation) dans l'état- s . Les points de transition en s séparent deux classes d'histoires, caractérisées par des valeurs de $\langle A \rangle_s$ qui n'ont pas le même comportement d'échelle à la limite thermodynamique.

Dans les modèles de champ moyen (chapitre 2), l'existence d'une énergie libre dynamique à la Ginzburg-Landau offre une grande simplification et permet notamment de visualiser directement les aspects dynamiques des transitions de phase habituelles (comme nous l'avons fait pour le modèle d'Ising). En outre, il est apparu que des modèles de verre, tant en champ moyen qu'en dimension finie, possèdent une transition de phase dynamique du premier ordre, et que l'état stationnaire est à la frontière entre une phase active et une phase inactive. La présence de cette transition est compatible avec le ralentissement dynamique observé dans ces systèmes, associé à la coexistence entre les histoires actives et inactives. L'image donnée par l'approche de champ moyen est confirmée en basse dimension par l'évaluation numérique directe de $\psi_A(s)$, en utilisant un algorithme en temps continu (chapitre 3).

Le cas des fluctuations du courant Q traversant un système hors d'équilibre (ou même à

l'équilibre) a engendré une quantité homérique de travaux concernant le théorème de fluctuation. Nous nous sommes efforcés dans la seconde partie de cette thèse de dépasser la simple analyse de cette symétrie en étudiant la fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ elle-même. Bodineau et Derrida ont proposé une méthode pour déterminer $\psi_Q(s)$ au moyen d'un principe d'additivité – équivalent à l'hydrodynamique fluctuante. Nous avons obtenu des résultats sur des systèmes où ce principe ne peut pas s'appliquer (le modèle de spins du chapitre 6 est trop fortement hors d'équilibre, les systèmes superdiffusifs du chapitre 8 ne sont pas... diffusifs), et les résultats permettent d'esquisser différentes classes d'universalité dynamiques indiquées par les comportements d'échelle de $\psi_Q(s)$ à la limite des grands systèmes. Le cas du processus d'exclusion symétrique s'est révélé assez riche : à la limite des grands systèmes, nous avons pu déterminer tous les cumulants du courant en utilisant une version du principe d'additivité qui tient compte des fluctuations du profil de densité dans le système. Cette étude a également fourni l'occasion de montrer que d'autres méthodes (l'Ansatz de Bethe ou une théorie de perturbation d'un opérateur de fermions libres) s'appliquent pour des régimes de courant différents.

9.2 Questions ouvertes

Nous donnons ici quelques voies à explorer.

- Dans l'approche en champ moyen, le cas des dynamiques qui ne vérifient pas le bilan détaillé reste à examiner. Nous avons donné un exemple au chapitre 6 pour l'observable 'courant d'entropie' Q_S dans le système de spins à deux températures, mais c'est un cas assez particulier car l'énergie libre dynamique $\mathcal{F}_S(m_1, m_2, s)$ est indépendante de s à l'ordre dominant, et toute la dépendance en s est contenue dans les corrections.
- On peut examiner s'il existe une énergie libre à la Landau au delà du champ moyen, en dimension finie. Le formalisme de Doi et Peliti [42, 105] offre bien sûr une possibilité mais l'apparition d'un champ conjugué à la densité (par exemple) masque la signification physique du résultat. L'hydrodynamique fluctuante, pour le courant de particules, offre un exemple où le champ conjugué peut être éliminé – on obtient le principe d'additivité. On peut se demander si c'est également le cas pour l'énergie libre associée à d'autres quantités que le courant de particules.
- Les modèles de verre étudiés au chapitre 4 appartiennent à la classe des systèmes cinématiquement contraints, qui offrent par construction deux phases dynamiques distinctes. Le cas des systèmes vitreux où cet ingrédient n'est pas introduit à la main dès le départ reste à explorer.
- Enfin, on peut se demander si le formalisme construit ici s'adapte aux systèmes décrits dans un cadre quantique. On songe notamment à certaines transitions de phase quantiques exotiques ou à l'étude de la décohérence.

Annexe A

Sauts et temps d'attente markoviens en temps continu

A.1 Exponentielle ordonnée en temps

On considère un vecteur $|\psi(t)\rangle$. Si $\mathbb{W}(t)$ est un opérateur linéaire dépendant du temps, la solution du système différentiel :

$$\partial_t |\psi(t)\rangle = \mathbb{W}(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.1})$$

est donnée par :

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{T} \exp \left(\int_0^t \mathbb{W} \right) |\psi(0)\rangle \quad (\text{A.2})$$

où l'exponentielle ordonnée en temps s'écrit :

$$\mathcal{T} \exp \left(\int_0^t \mathbb{W} \right) = \sum_{n \geq 0} \mathcal{T} \left(\int_0^t \mathbb{W} \right)^n \quad (\text{A.3})$$

$$= \sum_{n \geq 0} \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \mathbb{W}(t_n) \dots \mathbb{W}(t_1) \quad (\text{A.4})$$

$$= \sum_{n \geq 0} \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \dots \int_{t_{n-1}}^t dt_n \mathbb{W}(t_1) \dots \mathbb{W}(t_n) \quad (\text{A.5})$$

comme on le vérifie immédiatement.

A.2 Application aux processus stochastiques

A.2.1 Équation maîtresse

Soit $\{\mathcal{C}\}$ un ensemble fini de configurations et $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ des taux de probabilité définissant une dynamique markovienne en temps continu sur $\{\mathcal{C}\}$. On rappelle que l'équation

maîtresse s'écrit :

$$\partial_t P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left(W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t) - W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P(\mathcal{C}, t) \right) \quad (\text{A.6})$$

On définit par :

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (\text{A.7})$$

le taux d'échappement de \mathcal{C} vers les *autres* configurations \mathcal{C}' . Si $|\mathcal{C}\rangle$ est une base orthonormale de kets associés aux configurations, le vecteur : $|\psi(t)\rangle = \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}, t) |\mathcal{C}\rangle$ évolue selon l'équation (A.1), les éléments de l'opérateur \mathbb{W} étant :

$$\mathbb{W}_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') - r(\mathcal{C})\delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} = \begin{cases} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') & \text{si } \mathcal{C} \neq \mathcal{C}' \\ -r(\mathcal{C}) & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

A.2.2 Solution (1) : séquences de configurations quelconques

On peut obtenir $P(\mathcal{C}, t) = \langle \mathcal{C} | \psi(t) \rangle$ en fonction de l'état initial $|\psi(0)\rangle = \sum_{\mathcal{C}} P_0(\mathcal{C}) |\mathcal{C}\rangle$ en développant la solution explicite (A.2) :

$$P(\mathcal{C}, t) = \sum_{n \geq 0} \frac{t^n}{n!} \sum_{\mathcal{C}_0 \dots \mathcal{C}_{n-1}} \mathbb{W}_{\mathcal{C}\mathcal{C}_n} \mathbb{W}_{\mathcal{C}_n \mathcal{C}_{n-1}} \dots \mathbb{W}_{\mathcal{C}_1 \mathcal{C}_0} P_0(\mathcal{C}_0) \quad (\text{A.9})$$

Cette expression provient d'une simple exponentielle (non ordonnée dans le temps car l'opérateur d'évolution est indépendant du temps), mais il n'y a pas cependant d'interprétation immédiate en termes d'histoires, car la somme a lieu sur des séquences $\mathcal{C}_0 \dots \mathcal{C}$ dont deux configurations successives peuvent être identiques.

A.2.3 Solution (2) : séquences de configurations successivement distinctes

Pour obtenir une somme sur des histoires de configurations successivement distinctes, on peut récrire l'équation maîtresse (A.6) suivant :

$$\partial_t P(\mathcal{C}, t) + r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t) \quad (\text{A.10})$$

La quantité $Q(\mathcal{C}, t) = e^{t r(\mathcal{C})} P(\mathcal{C}, t)$ vérifie l'équation d'évolution :

$$\partial_t Q(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \tilde{W}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}, t) Q(\mathcal{C}', t) \quad (\text{A.11})$$

dont les taux de transitions, *dépendants du temps*, sont :

$$\tilde{W}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}, t) = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{t(r(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C}'))} \quad (\text{A.12})$$

L'opérateur d'évolution, dépendant du temps, n'a pas d'éléments diagonaux

$$\tilde{\mathbb{W}}_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = \tilde{W}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (\text{A.13})$$

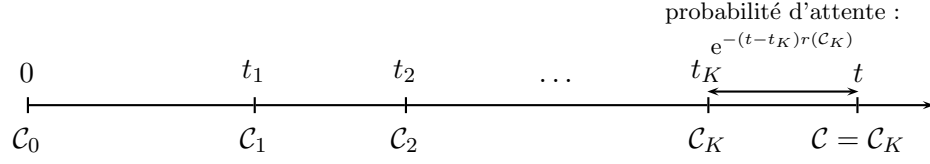


FIG. A.1 – Une réalisation donnée d’une histoire de configurations $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_K$. Entre les instants t_k et t_{k+1} , le système reste dans la configuration \mathcal{C}_k .

Un calcul rapide donne le développement de la solution explicite (A.4) :

$$\begin{aligned}
 P(\mathcal{C}, t) = \sum_{K \geq 0} \sum_{\mathcal{C}_0, \dots, \mathcal{C}_{K-1}} \int_0^t dt_K \int_0^{t_K} dt_{K-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \\
 \rho(0, \mathcal{C}_0; t_1, \mathcal{C}_1; \dots; t_{K-1}, \mathcal{C}_{K-1}; t_K, \mathcal{C}; t) \\
 \text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C}) P_0(\mathcal{C})
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

où $\rho(0, \mathcal{C}_0; t_1, \mathcal{C}_1; \dots; t_{K-1}, \mathcal{C}_{K-1}; t_K, \mathcal{C}; t)$ est la densité temporelle de probabilité des instants de changement de configuration (*cf.* figure 1.2, rappelée ci-dessus) :

$$r(\mathcal{C}_0)e^{-(t_1-t_0)r(\mathcal{C}_0)} \dots r(\mathcal{C}_{K-1})e^{-(t_K-t_{K-1})r(\mathcal{C}_{K-1})}e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C})}, \tag{A.15}$$

dans laquelle le dernier facteur exponentiel $e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C})}$ rend compte de la probabilité de ne pas sauter de $\mathcal{C} = \mathcal{C}_K$ entre t_K et t . La quantité

$$\text{Prob}(\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C}) P_0(\mathcal{C}) = \frac{W(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r(\mathcal{C}_0)} \dots \frac{W(\mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C})}{r(\mathcal{C})} P_0(\mathcal{C}_0) \tag{A.16}$$

représente elle la probabilité de l’histoire d’événements successivement distincts $\mathcal{C}_0 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C}$.

A.2.4 Évolution sans conservation de la probabilité

L’utilisation de la forme explicite (A.4) de l’exponentielle ordonnée dans le temps n’est pas restreinte aux évolutions qui conservent la probabilité (*i.e.* aux opérateurs tels que $\sum_{\mathcal{C}'} \mathbb{W}_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = 0$). En particulier, en posant $W_A(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = e^{-s\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')}W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ l’évolution (1.59) dans l’état- s associé à A s’écrit

$$\partial_t \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W_A(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}', s, t) - r(\mathcal{C}) \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t), \tag{A.17}$$

et grâce à (A.4) on obtient explicitement

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{K \geq 0} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_{K-1}} \int_0^t dt_K \int_0^{t_K} dt_{K-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \\
 r(\mathcal{C}_0)e^{-(t_1-t_0)r(\mathcal{C}_0)} \dots r(\mathcal{C}_{K-1})e^{-(t_K-t_{K-1})r(\mathcal{C}_{K-1})}e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C})} \\
 \frac{W_A(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r(\mathcal{C}_0)} \dots \frac{W_A(\mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C})}{r(\mathcal{C}_{K-1})} \hat{P}_A(\mathcal{C}, s, 0)
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

Ceci s'écrit également

$$\begin{aligned}
\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t) = & \sum_{K \geq 0} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_{K-1}} \int_0^t dt_K \int_0^{t_K} dt_{K-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \\
& r_s(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1-t_0)r_s(\mathcal{C}_0)} \dots r_s(\mathcal{C}_{K-1}) e^{-(t_{K-1}-t_K)r_s(\mathcal{C}_{K-1})} e^{-(t-t_K)r_s(\mathcal{C})} \\
& \frac{W_s(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r_s(\mathcal{C}_0)} \dots \frac{W_s(\mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C})}{r_s(\mathcal{C}_{K-1})} \\
& (\mathcal{Y}_{\mathcal{C}_0})^{t_1-t_0} \dots (\mathcal{Y}_{\mathcal{C}_{K-1}})^{t_K-t_{K-1}} (\mathcal{Y}_{\mathcal{C}})^{t-t_K}
\end{aligned} \tag{A.19}$$

avec

$$\mathcal{Y}_{\mathcal{C}} = e^{r_s(\mathcal{C})-r(\mathcal{C})} \tag{A.20}$$

en fonction de taux de transition d'une dynamique markovienne s -modifiée

$$W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = e^{-s\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \tag{A.21}$$

$$r_s(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W_s(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') . \tag{A.22}$$

On en déduit également l'expression de la fonction de partition dynamique associée à A

$$\begin{aligned}
Z_A(s, t) = & \sum_{K \geq 0} \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K} \int_0^t dt_K \int_0^{t_K} dt_{K-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \\
& r(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1-t_0)r(\mathcal{C}_0)} \dots r(\mathcal{C}_{K-1}) e^{-(t_{K-1}-t_K)r(\mathcal{C}_{K-1})} e^{-(t-t_K)r(\mathcal{C}_K)} \\
& \frac{W_A(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r(\mathcal{C}_0)} \dots \frac{W_A(\mathcal{C}_{K-1} \rightarrow \mathcal{C}_K)}{r(\mathcal{C}_{K-1})}
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Annexe B

Moyenne à temps final et moyenne intégrée au cours du temps dans l'état- s

Pour une observable donnée $b(\mathcal{C})$, on peut s'intéresser à deux quantités dans l'état- s :

- la valeur moyenne de b dans l'état final

$$\langle b \rangle_s \equiv \frac{\langle b(\mathcal{C}(t))e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (\text{B.1})$$

où les crochets $\langle \cdot \rangle$ désignent une moyenne sur toutes les histoires entre 0 et t ,

- et sa valeur moyenne intégrée au cours du temps

$$\langle B \rangle_s \equiv \frac{\left\langle \int_0^t d\tau b(\mathcal{C}(\tau))e^{-sA} \right\rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (\text{B.2})$$

Typiquement, $\langle B \rangle_s$ augmente linéairement au cours du temps, mais en général, à moins que $s = 0$, on a

$$\partial_t \langle B \rangle_s \neq \langle b \rangle_s \quad (\text{B.3})$$

Dans cette annexe, nous présentons plusieurs méthodes pour accéder à ces deux moyennes, soit en étudiant les vecteurs propres de l'opérateur d'évolution (en suivant par exemple Giardinà, Kurchan et Peliti [67]), soit, en utilisant une théorie de perturbation markovienne (annexe I). Enfin, nous présentons un exemple où l'on peut déterminer la valeur moyenne à temps intermédiaire

$$\langle b(\tau) \rangle_s \equiv \frac{\langle b(\mathcal{C}(\tau))e^{-sA} \rangle}{\langle e^{-sA} \rangle} \quad (\text{B.4})$$

à tout temps intermédiaire τ (dans cette expression $\langle \cdot \rangle$ désigne toujours une moyenne sur toutes les histoires entre 0 et t).

B.1 États propres

B.1.1 Définition

L'opérateur d'évolution \mathbb{W}_A s'écrit en fonction de ses vecteurs propres à gauche et à droite $|L_n\rangle$ et $|R_n\rangle$

$$\mathbb{W}_A = \sum_n \lambda_n |R_n\rangle \langle L_n| \quad (\text{B.5})$$

avec $\lambda_0 > \lambda_1 \geq \dots$. La valeur propre maximale λ_0 est égale à l'énergie libre dynamique $\psi_A(s)$. Il est toujours possible de normaliser les vecteurs pour que

$$\langle L_n | R_m \rangle = \delta_{nm} \quad \text{et} \quad \langle - | R_0 \rangle = 1 \quad (\text{B.6})$$

Les états propres correspondants $|L_0\rangle$ et $|R_0\rangle$ permettent de déterminer les valeurs moyennes $\langle b \rangle_s$ et $\langle B \rangle_s$.

B.1.2 Valeur moyenne au temps final

Par définition, partant d'un état initial $|P_0\rangle = \sum_{\mathcal{C}} P_0(\mathcal{C}) |\mathcal{C}\rangle$, on a

$$\langle b \rangle_s = \frac{\langle - | \hat{b} e^{t\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle}{\langle - | e^{t\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle} \quad (\text{B.7})$$

La limite de grands temps donne, avec les normalisations choisies

$$\langle b \rangle_s = \langle - | \hat{b} | R_0 \rangle \quad (\text{B.8})$$

L'état propre à droite $|R_0\rangle$ s'interprète donc comme la distribution de probabilité associée aux valeurs moyennes à temps final.

B.1.3 Valeur moyenne intégrée au cours du temps (1)

On peut estimer que la valeur moyenne intégrée $\langle B \rangle_s$ est donnée par la valeur moyenne de b aux temps intermédiaires

$$\langle b(\tau) \rangle_s \quad \text{avec} \quad 0 \ll \tau \ll t \quad (\text{B.9})$$

où la moyenne $\langle \cdot \rangle_s$ a toujours lieu sur les histoires entre 0 et t . Autrement dit, tout comme en théorie quantique [67], on a

$$\frac{1}{t} \langle B \rangle_s = \langle b(\tau) \rangle_s = \frac{\langle - | e^{(t-\tau)\mathbb{W}_A} \hat{b} e^{\tau\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle}{\langle - | e^{t\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle} \quad (\text{B.10})$$

mais dans le régime $0 \ll \tau \ll t$

$$e^{\tau\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle = e^{\tau\psi_K(s)} | R_0 \rangle \langle L_0 | P_0 \rangle = e^{\tau\psi_K(s)} | R_0 \rangle \quad (\text{B.11})$$

$$\langle - | e^{(t-\tau)\mathbb{W}_A} = \langle - | R_0 \rangle \langle L_0 | e^{(t-\tau)\psi_K(s)} = \langle L_0 | e^{(t-\tau)\psi_K(s)} \quad (\text{B.12})$$

On obtient ainsi

$$\frac{1}{t}\langle B \rangle_s = \langle b(\tau) \rangle_s = \langle L_0 | \hat{b} | R_0 \rangle \quad (\text{B.13})$$

À la différence du résultat (B.8), \hat{b} est évalué entre les états propres $\langle L_0 |$ et $| R_0 \rangle$. On a donc besoin de ces deux vecteurs pour déterminer la valeur moyenne de b intégrée au cours du temps dans l'état- s . Si la dynamique est réversible, on verra qu'il suffit de connaître $| R_0 \rangle$ car dans ce cas $| L_0 \rangle = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} | R_0 \rangle$.

B.1.4 Valeur moyenne intégrée au cours du temps (2)

Une autre manière d'accéder à la valeur moyenne intégrée au cours du temps est d'utiliser

$$\partial_t \langle B \rangle_s = \partial_t \partial_h \langle e^{hB} \rangle_s |_{h=0} \quad (\text{B.14})$$

$$= \partial_t \partial_h \left. \frac{\langle - | e^{t(\mathbb{W}_A + h\hat{b})} | P_0 \rangle}{\langle - | e^{t\mathbb{W}_A} | P_0 \rangle} \right|_{h=0} \quad (\text{B.15})$$

$$= \partial_t \partial_h \left. \frac{e^{t\lambda_0(h)} \langle L_0(h) | P_0 \rangle}{e^{t\lambda_0} \langle L_0 | P_0 \rangle} \right|_{h=0} \quad (\text{B.16})$$

$$\partial_t \langle B \rangle_s = \partial_h \lambda_0(h) |_{h=0} \quad (\text{B.17})$$

où $\langle L_0(h) |$ et $\lambda_0(h)$ désignent les éléments propres de l'opérateur perturbé $\mathbb{W}_A + h\hat{b}$. D'après la théorie de perturbation (pour un opérateur non-hermitien, annexe I), le premier ordre de perturbation $\partial_h \lambda_0(h) |_{h=0}$ de la valeur propre $\lambda_0(h)$ est précisément

$$\partial_t \langle B \rangle_s = \langle L_0 | \hat{b} | R_0 \rangle \quad (\text{B.18})$$

ce qui correspond au résultat trouvé précédemment : on a identité entre la valeur moyenne à temps intermédiaire et la valeur moyenne intégrée au cours du temps.

B.1.5 Dans l'état stationnaire non-modifié

Dans l'état stationnaire non-modifié ($s = 0$), les vecteurs propres à droite et à gauche sont $| R_0 \rangle = | P_{\text{st}} \rangle$ et $\langle L_0 | = \langle - |$. En particulier

$$\partial_t \langle B \rangle = \langle - | \hat{b} | P_{\text{st}} \rangle = \langle b \rangle \quad (\text{B.19})$$

Les deux moyennes de l'observable b coïncident. *Ceci n'est plus vrai pour les cumulants d'ordre supérieur.* Ainsi, pour un ensemble de particules sur L sites qui se créent et se détruisent avec des taux c et $1 - c$, les fonctions génératrices des cumulants du nombre n de particule intégré ou non au cours du temps s'écrivent

$$\frac{1}{L} \ln \langle e^{hn} \rangle = \ln (1 - c(1 - e^h)) \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{1}{Lt} \ln \langle e^{h \int_0^t n} \rangle = \frac{1}{2} \left[h - 1 + \sqrt{(h - 1)^2 + 4ch} \right] \quad (\text{B.21})$$

B.2 Bilan détaillé

Lorsque la dynamique vérifie le bilan détaillé, l'opérateur d'évolution est symétrisable et il est possible d'obtenir un lien entre les valeurs moyennes finales et intégrées au cours du temps, pour faible s .

B.2.1 Vecteurs propres à gauche et à droite

En général $\langle L_n |$ n'est pas le transposé de $|R_n\rangle$ et on ne peut pas faire le lien entre ces deux états propres. Pour $s = 0$, et pour une dynamique d'équilibre (bilan détaillé) on a $\mathbb{W}^\dagger = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} \mathbb{W} \hat{P}_{\text{eq}}$ et les états propres à gauche s'expriment en fonctions des états propres à droite

$$|L_n\rangle = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} |R_n\rangle \quad (\text{B.22})$$

Pour $n = 0$, on retrouve bien $|- \rangle = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} |P_{\text{eq}}\rangle$

Un autre cas où on peut expliciter un tel lien et celui des état- s associés à K en présence de bilan détaillé. On a

$$\mathbb{W}_K^\dagger = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} \mathbb{W}_K \hat{P}_{\text{eq}} \quad (\text{B.23})$$

et (B.22) est toujours valide. Plus généralement, si la quantité A s'écrit, pour une histoire

$$A = \sum_{k=0}^K \alpha(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1}) + \int_0^t d\tau a(\mathcal{C}(\tau)) \quad (\text{B.24})$$

avec

$$\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \alpha_1(\mathcal{C}) + \alpha_2(\mathcal{C}') \quad (\text{B.25})$$

l'opérateur d'évolution correspondant a pour éléments

$$(\mathbb{W}_A)_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = e^{-s\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') - \delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} [r(\mathcal{C}) + sa(\mathcal{C})] \quad (\text{B.26})$$

et on vérifie que l'opérateur diagonal

$$(\hat{Q})_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} = P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) e^{-s[\alpha_2(\mathcal{C}) - \alpha_1(\mathcal{C})]} \delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \quad (\text{B.27})$$

permet de symétriser \mathbb{W}_A

$$\mathbb{W}_A^\dagger = \hat{Q}^{-1} \mathbb{W}_A \hat{Q} \quad (\text{B.28})$$

et de faire le lien entre les états propres à gauche et à droite suivant

$$|L_n\rangle = \hat{Q}^{-1} |R_n\rangle \quad (\text{B.29})$$

B.2.2 Perturbations au premier ordre en s

Si la dynamique vérifie le bilan détaillé, on a vu que $\langle b \rangle_{s=0} = \partial_t \langle B \rangle_{s=0}$. Lorsque s est associé à K , on peut en fait déterminer le lien entre les premiers termes des développements de $\langle b \rangle_s$ et de $\partial_t \langle B \rangle_s$ pour s faible. Précisément :

$$\left. \begin{aligned} \langle b \rangle_s &= \langle b \rangle + sb^{(1)} + \dots \\ \partial_t \langle B \rangle_s &= \langle b \rangle + sB^{(1)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad \text{avec} \quad b^{(1)} = \frac{1}{2}B^{(1)} \quad (\text{B.30})$$

En effet, en notant $|R\rangle = \sum_{\mathcal{C}} R(\mathcal{C}, s)|\mathcal{C}\rangle$, et en utilisant $|L\rangle = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1}|R\rangle$, on a

$$\left\{ \begin{aligned} \langle b \rangle_s &= \langle -|\hat{b}|R\rangle = \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C})R(\mathcal{C}, s) \\ \partial_t \langle B \rangle_s &= \langle L|\hat{b}|R\rangle = \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C})R(\mathcal{C}, s)^2/P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \end{aligned} \right. \quad (\text{B.31})$$

De plus, on peut écrire pour s proche de 0 un développement de la forme

$$R(\mathcal{C}, s) = P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) + sf(\mathcal{C}) + \dots \quad (\text{B.32})$$

de sorte que

$$\left\{ \begin{aligned} \langle b \rangle_s &= \langle b \rangle + s \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C})f(\mathcal{C}) + \dots \\ \partial_t \langle B \rangle_s &= \langle b \rangle + 2s \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C})f(\mathcal{C}) + \dots \end{aligned} \right. \quad (\text{B.33})$$

d'où le résultat annoncé. Il n'y a en revanche pas de relation simple entre les termes suivants des développements.

L'égalité $b^{(1)} = \frac{1}{2}B^{(1)}$ s'écrit $\partial_s \langle b \rangle_s|_{s=0} = \frac{1}{2}\partial_t \partial_s \langle B \rangle_s|_{s=0}$, c'est-à-dire encore, en terme de la variable K :

$$\langle bK \rangle_c = \frac{1}{2}\partial_t \langle BK \rangle_c \quad (\text{B.34})$$

où les moyennes sont dans la dynamique non-modifiée ($s = 0$).

B.2.3 Une autre symétrie

On considère maintenant deux observables $b_1(\mathcal{C})$ et $b_2(\mathcal{C})$, ainsi que leur version intégrée dans le temps B_1 et B_2 . On cherche à effectuer le lien entre $\langle b_1 B_2 \rangle_c$ et $\langle b_2 B_1 \rangle_c$. Comme précédemment, on part de l'expression

$$\langle b_1 B_2 \rangle_c = \partial_h \left. \frac{\langle b_1 e^{hB_2} \rangle}{\langle e^{hB_2} \rangle} \right|_{h=0} \quad (\text{B.35})$$

$$= \partial_h \left. \frac{\langle -|\hat{b}_1 e^{t(\mathbb{W} + h\hat{b}_2)}|P_0\rangle}{\langle -|e^{t(\mathbb{W} + h\hat{b}_2)}|P_0\rangle} \right|_{h=0} \quad (\text{B.36})$$

On se place à $s = 0$. Pour l'instant, on ne suppose pas que la dynamique vérifie le bilan détaillé. On note $\lambda_n(h)$, $\langle L_n(h) |$, $|R_n(h)\rangle$ les éléments propres de l'opérateur modifié $\mathbb{W} + h\hat{b}_2$. On vérifie que (B.36) mène à :

$$\langle b_1 B_2 \rangle_c = \langle -|\hat{b}_1|R_0^{(1)}\rangle \quad (\text{B.37})$$

où $|R_0^{(1)}\rangle$ est le premier ordre en perturbation de $|R_0(h)\rangle$, qui vaut

$$|R_0^{(1)}\rangle = \partial_h |R_0(h)\rangle|_{h=0} = - \sum_{n \geq 1} \frac{\langle L_n | \hat{b}_2 | R_0 \rangle}{\lambda_n} |R_n\rangle \quad (\text{B.38})$$

et au final

$$\langle b_1 B_2 \rangle_c = - \sum_{n=1} \frac{\langle - | \hat{b}_1 | R_n \rangle \langle L_n | \hat{b}_2 | R_0 \rangle}{\lambda_n} \quad (\text{B.39})$$

$$\langle b_2 B_1 \rangle_c = - \sum_{n=1} \frac{\langle - | \hat{b}_2 | R_n \rangle \langle L_n | \hat{b}_1 | R_0 \rangle}{\lambda_n} \quad (\text{B.40})$$

où la deuxième relation est obtenue de la même manière (les indices 1 et 2 jouent un rôle muet). En général, ces deux expressions sont différentes.

En revanche, si le bilan détaillé est vérifié, on voit grâce à $|L_n\rangle = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1} |R_n\rangle$ et $|R_0\rangle = |P_{\text{eq}}\rangle$ que

$$\langle b_1 B_2 \rangle_c = \langle b_2 B_1 \rangle_c = - \sum_{n=1} \frac{\langle - | \hat{b}_1 | R_n \rangle \langle R_n | \hat{b}_2 | - \rangle}{\lambda_n} \quad (\text{B.41})$$

Autrement dit, si la dynamique est réversible, mesurer b_1 après avoir pondéré par B_2 revient au même que mesurer b_2 après avoir pondéré par B_1 .

B.2.4 Utilisation de la symétrie

On peut utiliser la symétrie (B.41) pour fournir une autre preuve de l'égalité $b^{(1)} = \frac{1}{2} B^{(1)}$. On vérifie facilement en effet que

$$\langle bK \rangle_c = \langle bR \rangle_c \quad (\text{B.42})$$

et que

$$\partial_t \langle BK \rangle_c = \langle bR \rangle_c + \langle rB \rangle_c \quad (\text{B.43})$$

où $r(\mathcal{C})$ est le taux habituel de sortie de la configuration \mathcal{C} et R la quantité intégrée correspondante. D'après (B.34), il suffit donc de montrer que

$$\langle rB \rangle_c = \langle bR \rangle_c \quad (\text{B.44})$$

mais c'est précisément vrai si la dynamique est réversible, d'après la symétrie du paragraphe précédent.

B.3 Modèle A : état-s à tout temps intermédiaire

Nous illustrons sur un exemple l'importance du temps auquel la moyenne dans l'état-s est effectuée (avec s conjugué à K). Le système considéré est décrit par un seul degré de liberté, le nombre n de ses particules. Celles-ci peuvent se créer ou s'annihiler avec des taux

$$W(n \rightarrow n+1) = cL, \quad W(n \rightarrow n-1) = n \quad (\text{B.45})$$

L'état stationnaire ($s = 0$) est une loi de Poisson discrète de paramètre cL : $P_{\text{eq}}(n) = e^{-cL}(cL)^n/n!$. Le paramètre c représente donc la densité de particules moyenne dans le système $c = \frac{1}{L}\langle n \rangle$ aux grands temps à $s = 0$. On souhaite déterminer le nombre de particules moyen $\rho(s; \tau, t) = \frac{1}{L}\langle n(\tau) \rangle_s$ dans l'état- s à temps intermédiaire $0 \leq \tau \leq t$, l'ensemble- s correspondant à toutes les histoires se déroulant entre 0 et t . On suppose l'état initial poissonien avec densité moyenne c_0 . On peut déterminer l'observable dans l'état- s $\rho(s; \tau, t)$ suivant

$$\rho(s; \tau, t) = -\frac{1}{L} \partial_\tau \partial_h \Big|_0 \left\langle \exp \left[-h \int_0^\tau n \right] \right\rangle_s \quad (\text{B.46})$$

On note $N_\tau = \int_0^\tau n$. On s'intéresse à la quantité

$$P_n \equiv P(n, h, s, t) = \int dN_\tau e^{-hN_\tau} \hat{P}(n, N_\tau, s, t) \quad (\text{B.47})$$

qui est telle que $\sum_n P(n, h, s, t) = \langle \exp \left[-sK - h \int_0^\tau n \right] \rangle$.

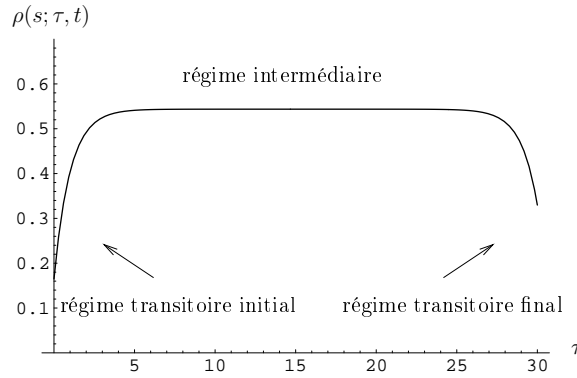


FIG. B.1 – Densité moyenne de particules dans le régime intermédiaire $0 \leq \tau \leq t$, dans l'état- s associé aux histoires entre 0 et t , pour le modèle A en champ moyen ($c_0 = 0.1$, $c = 0.2$, $s = -0.5$, $t = 30$).

Comme dans (1.59) et (1.76), l'équation d'évolution de P_n s'écrit

$$\partial_t P_n = e^{-s} [cL P_{n-1} + (n+1)P_{n+1}] - [cL + n + h n \theta(\tau - t)] P_n \quad (\text{B.48})$$

où θ est la fonction de Heaviside. D'après sa définition, P_n est une loi de Poisson $c_0 L$ au temps initial $t = 0$. Pour $t > 0$, on cherche P_n sous la forme d'un produit entre d'une loi de Poisson normalisée, de paramètre $L\rho_0(t)$, et un poids exponentiel $e^{L\Psi(t)}$, indépendant de n . D'après ce qui précède, ce poids représente précisément $e^{L\Psi(t)} = \langle \exp \left[-sK - h \int_0^\tau n \right] \rangle$. Les équations vérifiées par ces deux paramètres sont

$$\begin{cases} \dot{\rho}_0 = c e^{-s} - [1 + h\theta(\tau - t)] \rho_0 \\ \dot{\Psi} = \dot{\rho}_0 + e^{-s} \rho_0 - c \end{cases} \quad \text{avec les conditions initiales} \quad \begin{cases} \rho_0(0) = c_0 \\ \Psi(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.49})$$

En résolvant explicitement ces équations et en utilisant $\rho(s; \tau, t) = -\frac{1}{L} \partial_\tau \partial_h \Psi|_{h=0}$, on obtient (avec $z = e^{-s}$)

$$\rho(s; \tau, t) = c_0 [ze^{-\tau} + (1-z)e^{-t}] + c(1-e^{-\tau}) [ze^{\tau-t} + z^2(e^{\tau-t} - 1)] \quad (\text{B.50})$$

La densité à temps intermédiaire $\rho(s; \tau, t)$ présente trois régimes distincts (figure B.1).

- Un régime transitoire initial : pour $t \simeq 0$, $\tau \simeq 0$, le système garde une densité $\rho(s; \tau, t) \simeq c_0$ proche de la densité au temps initial.
- Un régime stationnaire intermédiaire : pour $1 \ll \tau \ll t$, le système adopte une densité stationnaire intermédiaire $\rho(s; \tau, t) \simeq c e^{-2s}$ qui est également la densité moyennée au cours du temps $\frac{1}{L} \partial_t \langle \int_0^s n \rangle_s$.
- Un régime transitoire final : pour $\tau \rightarrow t$ le système atteint une densité finale $\rho(s; t, t) = c e^{-s} = \frac{1}{L} \langle n(t) \rangle_s$ qui est celle de la distribution normalisée $\tilde{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ (1.62).

Annexe C

Opérateurs de spin et espace des aimantations

C.1 Espace des spins, espace des aimantations

C.1.1 Vecteur aimantation

À chaque configuration de spin $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ on associe un vecteur

$$|\sigma\rangle \quad (\text{C.1})$$

pour lequel on choisit le produit scalaire

$$\langle \sigma | \sigma' \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (\text{C.2})$$

À la distribution de probabilité $P(\sigma, t)$ des configurations de spin on associe le vecteur

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} P(\sigma, t) |\sigma\rangle \quad (\text{C.3})$$

On note $|\sigma| = \sum_i \sigma_i$ l'aimantation d'une configuration. On définit le vecteur $|M\rangle$ associé aux configurations d'aimantation M par

$$|M\rangle = \sum_{|\sigma|=M} |\sigma\rangle \quad (\text{C.4})$$

Le produit scalaire de tels états est

$$\langle M | M' \rangle = \binom{N}{\frac{N+M}{2}} \delta_{M, M'} \quad (\text{C.5})$$

C.1.2 Probabilité dans l'espace des aimantations

On suppose désormais que $P(\sigma, t)$ évolue dans le temps avec des taux de transition qui ne dépendent que de l'aimantation des configurations. Comme on l'a vu au paragraphe 2.1.2, probabilité $P(\sigma, t)$ n'est donc qu'une fonction de l'aimantation :

$$P(\sigma, t) = P_{\text{spins}}(M, t) \quad (\text{C.6})$$

Dans l'espace des M , pour définir une probabilité normalisée $P(M, t)$:

$$1 = \sum_{\sigma} P(\sigma, t) = \sum_M \sum_{|\sigma|=M} P_{\text{spins}}(M, t) = \sum_M \left(\frac{N}{\frac{N+M}{2}} \right) P_{\text{spins}}(M, t) \quad (\text{C.7})$$

on pose donc

$$P(M, t) = \left(\frac{N}{\frac{N+M}{2}} \right) P_{\text{spins}}(M, t) \quad (\text{C.8})$$

On remarque qu'avec ces définitions, le vecteur $|\psi\rangle$ défini par (C.3) s'écrit directement

$$|\psi\rangle = \sum_M P(M, t) |M\rangle \quad (\text{C.9})$$

C.1.3 Vecteurs duaux

Pour calquer la relation $\langle \sigma | \psi \rangle = P(\sigma, t)$, on cherche un vecteur $\langle \widetilde{M} |$ tel que

$$\langle \widetilde{M} | \psi \rangle = P(M, t) \quad (\text{C.10})$$

On trouve simplement

$$\langle \widetilde{M} | = \left(\frac{N}{\frac{N+M}{2}} \right)^{-1} \langle M | \quad (\text{C.11})$$

Ce vecteur vérifie

$$\langle \widetilde{M} | M' \rangle = \delta_{M, M'} \quad (\text{C.12})$$

Il serait possible de définir un nouveau produit scalaire entre les vecteurs aimantation, mais cela n'apporte pas de simplifications.

C.1.4 Action des opérateurs M^{\pm} sur les états $|M\rangle$

On définit les opérateurs d'aimantation

$$M^{\pm} = \frac{M^x \pm iM^y}{2} \quad \text{avec} \quad M^{x,y,z} = \sum_i \sigma_i^{x,y,z} \quad (\text{C.13})$$

où les $\sigma_i^{x,y,z}$ sont les matrices de Pauli agissant sur le i -ème spin $1/2$ de $|\sigma\rangle$. Leur action sur les vecteurs aimantation est

$$M^- |M\rangle = \frac{N - M + 2}{2} |M - 2\rangle \quad (\text{C.14})$$

$$M^+ |M\rangle = \frac{N + M + 2}{2} |M + 2\rangle \quad (\text{C.15})$$

On obtient par exemple la première de ces relations en écrivant

$$M^- |M\rangle = \sum_{|\sigma|=M} \sum_i \sigma_i^x \frac{1 + \sigma_i^z}{2} |\sigma\rangle = (\text{nombre de spins } \downarrow \text{ dans } |M - 2\rangle) |M - 2\rangle \quad (\text{C.16})$$

car M^- agit sur chaque configuration $|\sigma\rangle$ de $|M\rangle$ en la transformant en une configuration de $|M - 2\rangle$, et chaque configuration de $|M - 2\rangle$ a été obtenue un nombre de fois égal au nombre de ses spins \downarrow .

C.2 Description des systèmes de spin

C.2.1 Taux de transition

On suppose que le taux de retournement d'un spin individuel ne dépend que de l'aimantation de la configuration initiale

$$W(\uparrow \rightarrow \downarrow) = w^-(M) \quad (\text{C.17})$$

$$W(\downarrow \rightarrow \uparrow) = w^+(M) \quad (\text{C.18})$$

On sait déjà écrire (*cf.* paragraphe 2.1.5) à partir de l'équation maîtresse (2.8) sur les σ l'opérateur d'évolution correspondant

$$\mathbb{W} = M^- w^-(M^z) + M^+ w^+(M^z) - r(M^z) \quad (\text{C.19})$$

où $r(\mathcal{C})$ est le taux de changement de configuration

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (\text{C.20})$$

soit ici

$$r(M) = \frac{N-M}{2} w^+(M) + \frac{N+M}{2} w^-(M) \quad (\text{C.21})$$

On aimerait interpréter cet opérateur dans l'espace des aimantations, où les taux de transition s'écrivent

$$W(M \rightarrow M-2) = \frac{N+M}{2} w^-(M) \quad (\text{C.22})$$

$$W(M \rightarrow M+2) = \frac{N-M}{2} w^+(M) \quad (\text{C.23})$$

C.2.2 Équations d'évolution dans l'espace des aimantations

Dans l'équation d'évolution de $|\psi\rangle$ on peut séparer l'espace des configurations en tranches d'aimantation M fixée. En utilisant l'action (C.14-C.15) des opérateurs M^\pm sur les vecteurs $|M\rangle$, on obtient

$$\partial_t |\psi\rangle = \sum_{i, \sigma} \left\{ \sigma_i^x \frac{1 - \sigma_i^z}{2} w^+(\sigma) + \sigma_i^x \frac{1 + \sigma_i^z}{2} w^-(\sigma) \right\} P(\sigma) |\sigma\rangle - r(M^z) |\psi\rangle \quad (\text{C.24})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i, M} \left\{ \sigma_i^x \frac{1 - \sigma_i^z}{2} w^+(M) + \sigma_i^x \frac{1 + \sigma_i^z}{2} w^-(M) \right\} P_{\text{spins}}(M) |M\rangle - r(M^z) |\psi\rangle \\ \partial_t |\psi\rangle &= \sum_M \left\{ \frac{N+M+2}{2} w^+(M) |M+2\rangle + \right. \\ &\quad \left. \frac{N-M+2}{2} w^-(M) |M-2\rangle \right\} P_{\text{spins}}(M) - r(M^z) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Cette dernière expression (C.25) est cependant *a priori* incompatible avec une traduction directe de l'équation maîtresse dans l'espace des M

$$\partial_t P(M) = W(M-2 \rightarrow M)P(M-2) + W(M+2 \rightarrow M)P(M+2) - r(M)P(M) \quad (\text{C.26})$$

sous la forme d'une équation sur $|\psi\rangle$ que l'on aurait aimé écrire

$$\begin{aligned} \partial_t |\psi\rangle = \sum_M \left\{ \frac{N-M}{2} w^+(M) |M+2\rangle + \right. \\ \left. \frac{N+M}{2} w^-(M) |M-2\rangle \right\} P(M) |M\rangle - r(M^z) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

Un moyen de rendre les relations (C.25) et (C.27) compatibles est de réexprimer (C.25) sur les vecteurs $|\widetilde{M}\rangle$ en utilisant les relations

$$P_{\text{spins}}(M) |M-2\rangle = \frac{N+M}{N-M+2} P(M) |\widetilde{M-2}\rangle \quad (\text{C.28})$$

$$P_{\text{spins}}(M) |M+2\rangle = \frac{N-M}{N-M-2} P(M) |\widetilde{M+2}\rangle \quad (\text{C.29})$$

On obtient alors

$$\begin{aligned} \partial_t |\psi\rangle = \sum_M \left\{ \frac{N-M}{2} w^+(M) |\widetilde{M+2}\rangle + \right. \\ \left. \frac{N+M}{2} w^-(M) |\widetilde{M-2}\rangle \right\} P(M) |M\rangle - r(M^z) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

L'opérateur qui correspond à l'écriture directe (C.27) est donc le même que celui qui correspond à (C.30), au changement de base près $|M\rangle \mapsto |\widetilde{M}\rangle$, qui ne modifie pas le spectre.

Annexe D

États cohérents de spin

Considérons un opérateur \mathbb{W} qui s'exprime, à l'instar des opérateurs d'évolution rencontrés au paragraphe 2.1.5, en fonction d'opérateurs de spin M^z , M^+ et M^- . Nous montrons dans cette annexe qu'il est possible de déterminer le comportement aux grands temps de $\langle e^{t\mathbb{W}} \rangle$ suivant

$$\langle e^{t\mathbb{W}} \rangle \sim \int \mathcal{D}m \mathcal{D}\phi \exp \int_0^t \{ N\phi \partial_t m + \mathcal{W}(m, \phi) \} \quad (\text{D.1})$$

où la fonction $\mathcal{W}(m, \phi)$ s'obtient à partir de \mathbb{W} . On suppose que les opérateurs de spin agissent sur l'espace des spin $j = N/2$ (autrement dit : l'aimantation varie entre $-j$ et j). Suivant [88, 106], on définit l'état cohérent de spin $|\zeta\rangle$ associé au nombre complexe ζ par :

$$|\zeta\rangle = \exp(\zeta M^+) | -j, j \rangle \quad (\text{D.2})$$

où $| -j, j \rangle$ est l'état propre de M^z de plus basse aimantation. Ces états cohérents sont normalisés selon $\langle \zeta | \zeta' \rangle = (1 + \bar{\zeta}' \zeta)^{2j}$ et vérifient la relation de fermeture

$$\mathbf{1} = \frac{2j+1}{\pi} \int \frac{d^2\zeta}{(1 + \bar{\zeta}\zeta)^{2j+2}} |\zeta\rangle \langle \zeta| \quad (\text{D.3})$$

Leur action sur les opérateurs de spin est

$$\mathcal{N}^2 \langle \zeta | M^z | \zeta \rangle = j \frac{\bar{z}z - 1}{\bar{z}z + 1}, \quad \mathcal{N}^2 \langle \zeta | M^+ | \zeta \rangle = j \frac{\bar{z}}{\bar{z}z + 1}, \quad \mathcal{N}^2 \langle \zeta | M^- | \zeta \rangle = j \frac{z}{\bar{z}z + 1} \quad (\text{D.4})$$

où l'on a posé $\mathcal{N} = \langle z | z \rangle = 1/(1 + \bar{z}z)$. Aux grands temps, le comportement de $\langle e^{t\mathbb{W}} \rangle$ est donné par $\langle \zeta_f | e^{t\mathbb{W}} | \zeta_i \rangle$, où $|\zeta_i\rangle$ et $|\zeta_f\rangle$ sont deux états cohérents quelconques. En suivant la procédure habituelle [42, 105], on insère dans l'écriture de $\langle \zeta_f | e^{t\mathbb{W}} | \zeta_i \rangle$ un grand nombre de relations de fermeture (D.3). La valeur moyenne de $e^{t\mathbb{W}}$ s'obtient au moyen d'une intégrale fonctionnelle [121] sur deux champs m et ϕ , de la forme (D.1) :

$$\langle e^{t\mathbb{W}} \rangle \sim \int \mathcal{D}m \mathcal{D}\phi e^{-S[m, \phi; t]} \quad (\text{D.5})$$

où l'action $S[m, \phi]$ vaut

$$S[m, \phi; t] = - \int_0^t \left\{ 2j\phi \partial_t m + \frac{\langle \zeta | \mathbb{W} | \zeta \rangle}{\langle \zeta | \zeta \rangle} \right\} \quad (\text{D.6})$$

et l'état cohérent $|\zeta\rangle$ est paramétrisé par

$$\zeta = e^{-i\phi} \cot \frac{\theta}{2} \quad \text{avec} \quad m = \cos \theta \quad (\text{D.7})$$

Dans la limite $N \rightarrow \infty$ la quantité $\langle \zeta | \mathbb{W} | \zeta \rangle / \langle \zeta | \zeta \rangle$ se trouve à l'ordre dominant en substituant dans \mathbb{W} les opérateurs M^z , M^+ et M^- par les fonctions suivantes :

$$\begin{cases} M^z \rightarrow Nm \\ M^\pm \rightarrow \frac{1}{2}N\sqrt{1-m^2}e^{\pm\phi} \end{cases}, \quad (\text{D.8})$$

d'après (D.4) et (D.7). On retrouve les expressions (2.38) et (2.39) utilisées au paragraphe 2.1.6.

Annexe E

Théorie de Donsker-Varadhan et énergie libre dynamique à la Landau

On considère un processus de Markov de taux de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ entre ses configurations $\{\mathcal{C}\}$. Son état stationnaire $P_{\text{st}}(\mathcal{C})$ est approximé, aux grands temps, par la *mesure expérimentale*

$$\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = \int_0^t d\tau \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}(\tau)} \quad (\text{E.1})$$

Cette quantité, qui dépend de l’histoire du système, représente le temps passé dans la configuration \mathcal{C} entre 0 et t . C’est l’objet central de la théorie de Donsker-Varadhan [43] (voir [97] pour une présentation). Pour “la plupart des histoires”, on a en effet $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = P_{\text{st}}(\mathcal{C})$, au moins dans le sens suivant : $\lim \frac{1}{t} \langle \bar{\mu}(\mathcal{C}, t) \rangle = P_{\text{st}}(\mathcal{C})$. On vérifie en effet qu’à tout temps $\partial_t \langle \bar{\mu}(\mathcal{C}, t) \rangle = P(\mathcal{C}, t)$ (chaque membre de cette égalité dépend de l’état initial). La théorie de Donsker-Varadhan donne les grandes déviations de la mesure expérimentale $\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$ dans la limite de grands temps. Il y a des liens naturels entre cette théorie et l’approche présentée dans cette thèse : considérons par exemple une observable $b(\mathcal{C})$ qui dépend de la configuration du système. La mesure expérimentale $\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$ fournit un lien entre $b(\mathcal{C})$ et $b(\mathcal{C}(\tau))$

$$\sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C}) \bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = \int_0^t d\tau b(\mathcal{C}(\tau)) \quad (\text{E.2})$$

En d’autres termes, $\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$ est la mesure (normalisée à $\sum_{\mathcal{C}} \bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = t$) telle qu’à tout temps, $\langle b \rangle_{\bar{\mu}} = \int_0^t d\tau b(\mathcal{C}(\tau))$. [Pour toute mesure μ , on note $\langle b \rangle_{\mu} = \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C})$ la moyenne de b dans la mesure μ .] Dans cette annexe, nous montrons comment obtenir le paysage d’énergie libre dynamique à la Landau (paragraphe 2.1.4) à partir de la théorie de Donsker-Varadhan. Les résultats sont obtenus ici sans effectuer d’approximation de champ moyen.

E.1 Donsker-Varadhan large deviation function

Aux grands temps, la probabilité que $\frac{1}{t}\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$ soit égal à une certaine mesure $\mu(\mathcal{C})$ est maximale pour $\mu(\mathcal{C}) = P_{\text{st}}(\mathcal{C})$. Le but de la théorie de Donsker-Varadhan est de déterminer les grandes déviations de la distribution de $\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$.

E.1.1 Énoncé du résultat

Le théorème de Donsker-Varadhan [43] affirme que dans la limite de grands temps

$$\text{Prob}[\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = t\mu(\mathcal{C})] = e^{tJ[\mu]} \quad \text{avec} \quad J[\mu] = \inf_{\rho > 0} \langle \rho | \mathbb{W} | \rho^{-1} \mu \rangle \quad (\text{E.3})$$

où l'infimum est pris sur les mesures normalisées ($\langle - | \rho \rangle = 1$) et où on note $|f\rangle = \sum_{\mathcal{C}} f(\mathcal{C})|\mathcal{C}\rangle$ pour toute fonction f de la configuration. Explicitement (cf. par exemple [97])

$$J[\mu] = \inf_{\rho > 0} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \left\{ W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \frac{\rho(\mathcal{C}')}{\rho(\mathcal{C})} \mu(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} \right\} \quad (\text{E.4})$$

À l'équilibre (*i.e.* si \mathbb{W} vérifie le bilan détaillé par rapport à une loi d'équilibre $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$) l'infimum est atteint pour $\rho = (\mu/P_{\text{eq}})^{1/2}$ et la fonction de grandes déviations s'écrit

$$J[\mu] = \langle \mu^{1/2} | \mathbb{W}^{\text{sym}} | \mu^{1/2} \rangle \quad (\text{E.5})$$

où $\mathbb{W}^{\text{sym}} = \hat{P}_{\text{eq}}^{-1/2} \mathbb{W} \hat{P}_{\text{eq}}^{1/2}$ est l'opérateur d'évolution symétrisé. Explicitement :

$$J_{\text{eq}}[\mu] = \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \left\{ [W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})]^{1/2} [\mu(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C}')]^{1/2} - r(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} \right\} \quad (\text{E.6})$$

Nous supposons dans la suite que de bilan détaillé est vérifié.

E.1.2 Lien avec l'approche opératorielle

Plutôt que de déterminer la probabilité “microcanonique” $\text{Prob}[\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) = t\mu(\mathcal{C})] = e^{tJ[\mu]}$ on peut utiliser un champ $h(\mathcal{C})$ dépendant de la configuration, conjugué à $\bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$, et déterminer la fonction de partition “canonique” associée $\langle e^{\sum_{\mathcal{C}} h(\mathcal{C}) \bar{\mu}(\mathcal{C}, t)} \rangle \equiv e^{t\Psi[h]}$. Les fonctions de grandes déviations $\Psi[h]$ et $J[\mu]$ sont obtenus l'une de l'autre la transformée Legendre :

$$\Psi[h] = \sup_{\langle - | \mu \rangle = 1} \{ J[\mu] + \langle h \rangle_{\mu} \} \quad (\text{E.7})$$

où le supremum est pris sur toutes les mesures μ normalisées ($\langle - | \mu \rangle = 1$) et $\langle h \rangle_{\mu} = \langle - | \hat{h} | \mu \rangle$ est la moyenne de h par rapport à μ . De plus, d'après (E.2), on a

$$\left\langle e^{\sum_{\mathcal{C}} h(\mathcal{C}) \bar{\mu}(\mathcal{C}, t)} \right\rangle = \left\langle e^{\int_0^t d\tau h(\mathcal{C}(\tau))} \right\rangle \quad (\text{E.8})$$

$$\sim \exp \{ t \max \text{sp} (\mathbb{W} + \hat{h}) \} \quad (\text{E.9})$$

où \hat{h} est l'opérateur diagonal d'éléments $h(\mathcal{C})$. On obtient

$$\Psi[h] = \max \text{sp } (\mathbb{W} + \hat{h}) \quad (\text{E.10})$$

$$= \max \text{sp } (\mathbb{W}^{\text{sym}} + \hat{h}) \quad (\text{E.11})$$

$$= \sup_{\langle \mu | \mu \rangle = 1} \{ \langle \mu | \mathbb{W}^{\text{sym}} | \mu \rangle + \langle \mu | \hat{h} | \mu \rangle \} \quad (\text{E.12})$$

$$= \sup_{\langle - | \mu \rangle = 1} \{ \langle \mu^{1/2} | \mathbb{W}^{\text{sym}} | \mu^{1/2} \rangle + \langle h \rangle_{\mu} \} \quad (\text{E.13})$$

En comparant (E.7) et (E.13) on obtient bien l'expression d'équilibre (E.5) de $J[\mu]$. Cette approche canonique permet de faire le lien avec l'approche opératorielle du chapitre 2, mais présente des problèmes d'inversion de transformée de Legendre, comme au paragraphe 2.1.4. Dans la suite de cette annexe, nous conservons le point de vue “microcanonique” de Donsker et Varadhan.

E.2 Énergie libre dynamique de Landau à $s = 0$

Pour une observable donnée $b(\mathcal{C})$ la moyenne intégrée au cours du temps

$$\bar{B}(t) = \int_0^t d\tau b(\mathcal{C}(\tau)) \quad (\text{E.14})$$

se comporte en $t\langle b \rangle$ aux grands temps. On peut s'intéresser à la distribution de probabilité (pdf) de $\bar{B}(t)$, qui contient *a priori* plus d'informations sur la dynamique que la pdf de $b(\mathcal{C})$ dans l'état stationnaire. Dans la limite des grands temps, la pdf de $\bar{B}(t)$ évolue exponentiellement en temps suivant

$$\text{Prob}[\bar{B}(t) = tB] \sim e^{-t\mathcal{F}(B)} \quad (\text{E.15})$$

La fonction de grandes déviations $\mathcal{F}(B)$ s'obtient au moyen de la fonctionnelle $J[\mu]$ de Donsker-Varadhan. En utilisant l'égalité $\bar{B}(t) = \sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C}) \bar{\mu}(\mathcal{C}, t)$, on a en effet

$$\text{Prob}[\bar{B}(t) = tB] = \langle \delta(\bar{B}(t) - tB) \rangle \quad (\text{E.16})$$

$$= \int d\mu \langle \delta(\bar{B}(t) - tB) \delta(\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) - t\mu(\mathcal{C})) \rangle \quad (\text{E.17})$$

$$= \int d\mu \delta\left(\sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C}) - B\right) \langle \delta(\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) - t\mu(\mathcal{C})) \rangle \quad (\text{E.18})$$

$$= \int d\mu \delta(\langle b \rangle_{\mu} - B) e^{tJ[\mu]} \quad (\text{E.19})$$

et donc

$$\mathcal{F}(B) = - \sup_{\substack{\mu \text{ tel que} \\ \langle b \rangle_{\mu} = B}} J[\mu] \quad (\text{E.20})$$

Cette égalité donne l'équivalent du paysage d'énergie libre dynamique à la Landau pour un système markovien quelconque (vérifiant le bilan détaillé).

En champ moyen, à l'équilibre, et lorsque les taux de transitions s'expriment en fonction d'une grande observable b (dans une limite de grands systèmes), alors, dans cette limite, $[\mu(b)\mu(b')]^{1/2} \simeq \mu(b)$ et (E.6) permet d'obtenir, comme attendu

$$\mathcal{F}(b) = r(b) - \sum_{b'} [W(b \rightarrow b')W(b' \rightarrow b)]^{1/2} \quad (\text{E.21})$$

Cette relation généralise l'expression (2.25) obtenue pour les systèmes de spin.

E.3 Énergie libre dynamique de Landau pour s quelconque

On aimerait appliquer le raisonnement du paragraphe précédent à l'ensemble- s associé à une variable extensive en temps A . Il n'est pas possible d'utiliser directement le résultat de Donsker and Varadhan, car il ne s'applique qu'aux dynamiques qui conservent la probabilité (et par exemple $\hat{P}_A(\mathcal{C}, s, t)$ satisfait une équation d'évolution qui ne conserve pas la probabilité). Pour contourner ce problème, on considère d'abord une pondération de la dynamique associée à $\bar{B}_2(s, t) = \int_0^t d\tau b_2(\mathcal{C}(\tau), s)$ où $b_2(\mathcal{C}, s)$ est une observable qui dépend de la configuration. Comme au paragraphe précédent,

$$\langle e^{\bar{B}_2(s, t)} \delta(\bar{B}(t) - tB) \rangle = \int d\mu \langle \delta(\bar{B}(t) - tB) e^{\bar{B}_2(s, t)} \delta(\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) - t\mu(\mathcal{C})) \rangle \quad (\text{E.22})$$

$$= \int d\mu \delta(\sum_{\mathcal{C}} b(\mathcal{C})\mu(\mathcal{C}) - B) e^{t \sum_{\mathcal{C}} \mu(\mathcal{C}) b_2(\mathcal{C}, s)} \langle \delta(\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) - t\mu(\mathcal{C})) \rangle \quad (\text{E.23})$$

$$= \int d\mu \delta(\langle b \rangle_{\mu} - B) e^{t(J[\mu] + \langle b_2(s) \rangle_{\mu})} \quad (\text{E.24})$$

et donc (E.22) se comporte exponentiellement en temps selon $\sim e^{-t\mathcal{F}(B, s)}$, avec

$$\mathcal{F}(B, s) = - \sup_{\substack{\mu \text{ tel que} \\ \langle b \rangle_{\mu} = B}} \{J[\mu] + \langle b_2(s) \rangle_{\mu}\} \quad (\text{E.25})$$

On peut maintenant utiliser la relation (3.6), qui implique que les moyennes sur les histoires pondérées par e^{-sA} sont égales à celles pondérées par $e^{B_2(s, t)}$, dans une dynamique s -modifiée, de taux W_s and r_s donnés en (3.4-3.5), et avec $b_2(\mathcal{C}, s) = r_s(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})$. On obtient $\langle e^{-sA} \delta(\bar{B}(t) - tB) \rangle \sim e^{-t\mathcal{F}_A(B, s)}$ avec

$$\mathcal{F}_A(B, s) = - \sup_{\substack{\mu \text{ with} \\ \langle b \rangle_{\mu} = B}} J_A[\mu, s] \quad (\text{E.26})$$

et

$$J_A[\mu, s] = \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \left\{ e^{-\frac{s}{2}[\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}') + \alpha(\mathcal{C}', \mathcal{C})]} [W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})]^{1/2} [\mu(\mathcal{C})\mu(\mathcal{C}')]^{1/2} - r(\mathcal{C})\mu(\mathcal{C})\delta_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} \right\} \quad (\text{E.27})$$

La quantité $\mathcal{F}_A(B, s)$ représente une énergie libre dynamique de Landau à $s \neq 0$, similaire à celle du chapitre 2 mais hors du cadre champ-moyen. De plus, par souci de simplicité, nous avons présenté les résultats en supposant vérifié le bilan détaillé, mais ils ne dépendent pas de cette hypothèse. Par exemple, la relation (E.26) est valide de manière générale avec

$$J_A[\mu, s] = \inf_{\rho > 0} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \left\{ e^{-s\alpha(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \frac{\rho(\mathcal{C}')}{\rho(\mathcal{C})} \mu(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C}) \mu(\mathcal{C}) \delta_{\mathcal{C}'\mathcal{C}} \right\} \quad (\text{E.28})$$

Enfin, les résultats précédents donnent également une généralisation du théorème de Donsker-Varadhan (E.3) dans le cadre d'une statistique sur les histoires dans l'ensemble- s :

$$\left\langle e^{-sA} \delta(\bar{\mu}(\mathcal{C}, t) - t\mu(\mathcal{C})) \right\rangle = e^{t J_A[\mu, s]} \quad \text{avec} \quad J_A[\mu, s] = \inf_{\rho > 0} \langle \rho | \mathbb{W}_A | \rho^{-1} \mu \rangle \quad (\text{E.29})$$

et $J_A[\mu, s] = \langle \mu^{1/2} | \mathbb{W}_A^{\text{sym}} | \mu^{1/2} \rangle$ lorsque \mathbb{W}_A peut être symétrisé.

Annexe F

Spectre d'un opérateur quadratique en a et a^\dagger

On cherche à déterminer le spectre d'un opérateur \hat{H} quadratique en les opérateurs bosoniques a et a^\dagger de création et d'annihilation :

$$\hat{H} = Xa^2 + 2Za^\dagger a + Y(a^\dagger)^2 \quad (\text{F.1})$$

On s'intéresse à la situation où $\Delta^2 = Z^2 - XY$ est positif et $Y \neq 0$ (ces hypothèses sont vérifiées pour la partie quadratique des opérateurs d'évolution du type \mathbb{W}_A , et assurent que H possède un spectre borné inférieurement). Lorsque \hat{H} est hermitien ($X = Y$), son spectre peut s'obtenir par une transformation de Bogoliubov. Dans le cas plus général où \hat{H} n'est pas hermitien, nous allons déterminer son spectre au moyen de deux transformations de similitude successives. On considère tout d'abord

$$Q_1 = e^{\frac{Z-\Delta}{2Y}a^2}, \quad (\text{F.2})$$

qui laisse a inchangé et agit sur a^\dagger suivant :

$$Q_1^{-1}a^\dagger Q_1 = a^\dagger - \frac{Z-\Delta}{Y}a \quad (\text{F.3})$$

Cette transformation de similitude élimine le terme en a^2 de \hat{H} :

$$\hat{H}_1 = Q_1^{-1}\hat{H}Q_1 = Y(a^\dagger)^2 + 2\Delta a^\dagger a + \Delta - Z \quad (\text{F.4})$$

De même, l'opérateur

$$Q_2 = e^{-\frac{Y}{4\Delta}(a^\dagger)^2} \quad (\text{F.5})$$

laisse a^\dagger inchangé et agit sur a suivant :

$$Q_2^{-1}aQ_2 = a - \frac{Y}{2\Delta}a^\dagger \quad (\text{F.6})$$

Cette transformation de similitude élimine le terme en $(a^\dagger)^2$ de \hat{H}_1 :

$$\hat{H}_2 = Q_2^{-1}\hat{H}_1Q_2 = 2\Delta a^\dagger a + \Delta - Z \quad (\text{F.7})$$

Les transformations (F.3) et (F.6) ne changent pas le spectre de \hat{H} . Son fondamental est donné en particulier par

$$\min \text{Sp } \hat{H} = \Delta - Z = \sqrt{Z^2 - XY} - Z \quad (\text{F.8})$$

Annexe G

Ansatz de Bethe pour les modèles d'exclusion

On considère un modèle d'exclusion symétrique de L sites avec conditions aux limites périodiques (chapitre 7). L'opérateur \mathbb{W}_Q associé au courant total Q traversant le système s'écrit en termes des matrices de Pauli (opérateurs de spin 1/2) :

$$\mathbb{W}_Q(s) = \sum_{i=1}^L \left[\frac{\sigma_i \sigma_{i+1} - 1}{2} + e^s \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + e^{-s} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ \right] \quad (\text{G.1})$$

La fonction de grandes déviations $\psi_Q(s)$ est la valeur propre maximale de $\mathbb{W}_Q(s)$. Comme $\mathbb{W}_Q(s)$ conserve le nombre de particules, on peut déterminer ses fonctions propres sur chaque sous-espace qui possède un nombre N fixé de particules. En suivant [70, 34, 35], on peut chercher le spectre de $\mathbb{W}_Q(s)$ en utilisant la méthode de Bethe. On note $\phi(x_1, \dots, x_N)$ un état dont les N particules sont situées en $x_1 < \dots < x_N$. L'Ansatz de Bethe consiste à remarquer que :

$$\phi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{P \in \mathfrak{S}_N} A_P \zeta_{P_1}^{x_1} \dots \zeta_{P_N}^{x_N} \quad (\text{G.2})$$

est un état propre de $\mathbb{W}_Q(s)$ de valeur propre

$$\psi_Q(s) = -2N + e^{-s} [\zeta_1 + \dots + \zeta_N] + e^s \left[\frac{1}{\zeta_1} + \dots + \frac{1}{\zeta_N} \right] \quad (\text{G.3})$$

dès lors que :

$$\begin{aligned} A_{2,1,3,\dots,L} &= S_{1,2} A_{1,2,3,\dots,L} \\ A_{2,3,1,\dots,L} &= S_{1,2} S_{1,3} A_{1,2,3,\dots,L} \\ A_{1,3,2,\dots,L} &= S_{2,3} A_{1,2,3,\dots,L} \\ &\text{etc} \dots \end{aligned} \quad (\text{G.4})$$

$A_{1,2,\dots,L}$ a une valeur arbitraire qui fixe la normalisation de ϕ et $S_{i,j}$ est "l'amplitude de diffusion" à deux corps :

$$S_{i,j} = -\frac{e^s - 2\zeta_j + e^{-s}\zeta_i\zeta_j}{e^s - 2\zeta_i + e^{-s}\zeta_i\zeta_j} \quad (\text{G.5})$$

Elle vérifie :

$$\phi(x_1, x_2)/A_{1,2} = \zeta_1^{x_1} \zeta_2^{x_2} + S_{1,2} \zeta_2^{x_1} \zeta_1^{x_2} \quad (\text{G.6})$$

Les équations de Bethe sont les deux conditions suivantes, déduites de (G.2, G.4) et des conditions aux limites périodiques :

$$\zeta_i^L = \prod_{\substack{j=1..N \\ j \neq i}} S_{j,i} \quad (\text{G.7})$$

$$1 = \prod_{j=1..N} \zeta_j \quad (\text{G.8})$$

Pour chaque solution ζ_1, \dots, ζ_N de (G.7, G.8), $\psi_Q(s)$ donné par (G.3) est valeur propre de $\mathbb{W}_Q(s)$ pour le vecteur propre (G.2). On cherche l'unique solution (d'après Perron-Frobenius) telle que $\psi_Q(0) = 0$ c'est-à-dire telle que les ζ_i tendent vers 1 lorsque s tend vers 0.

Pour les fluctuations de K dans le SEP, il suffit de remplacer les relations (G.1), (G.3) et (G.5) respectivement par :

$$\mathbb{W}_K(s) = \sum_{i=1}^L \left[\frac{\sigma_i \sigma_{i+1} - 1}{2} + e^{-s} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + e^{-s} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ \right] \quad (\text{G.9})$$

$$\psi_K(s) = -2N + e^{-s} [\zeta_1 + \dots + \zeta_N] + e^s \left[\frac{1}{\zeta_1} + \dots + \frac{1}{\zeta_N} \right] \quad (\text{G.10})$$

$$S_{i,j} = -\frac{e^s - 2\zeta_j + e^{-s} \zeta_i \zeta_j}{e^s - 2\zeta_i + e^{-s} \zeta_i \zeta_j} \quad (\text{G.11})$$

Les équations de Bethe à résoudre étant toujours données par (G.7, G.8).

Pour le TASEP, les équations de Bethe ont la même forme que (G.7, G.8) mais la fonction génératrice s'écrit :

$$\psi_Q^{\text{TASEP}}(s) = -N + e^{-s} \left[\frac{1}{\zeta_1} + \dots + \frac{1}{\zeta_N} \right] \quad (\text{G.12})$$

et l'amplitude à deux corps :

$$S_{i,j}^{\text{TASEP}} = -\frac{e^{-s} - \zeta_j}{e^{-s} - \zeta_i} \quad (\text{G.13})$$

La première équation de Bethe prend la forme simple :

$$\zeta_i^{-L} (e^{-s} - \zeta_i)^N = (-1)^{N-1} \prod_{j=1..N} (e^{-s} - \zeta_j) \quad (\text{G.14})$$

Derrida et Lebowitz ont montré [34] qu'il est possible de résoudre (G.12-G.14) et de déterminer exactement la fonction $\psi_Q(s)$ ($= \psi_K(s)$) dans ce système.

Annexe H

Ansatz de Bethe continu

Nous détaillons dans cette annexe l'obtention du développement limité de $\psi_K(s)$ pour le SEP au voisinage de $s = 0^-$ par l'Ansatz de Bethe, dans sa version continue proposée par Baxter [7], bien adaptée pour décrire la limite des grands systèmes. Nous reprenons les notations du paragraphe 7.2.4, où le développement de $\psi_K(s)$ avait été obtenu au premier ordre

$$\frac{1}{L}\psi_K(s) = -2\rho(1 - \rho)s + o(s) \quad (\text{H.1})$$

À l'ordre suivant en s , les inconnues $\rho_0(k)$ et Q_0 sont remplacées par $\rho(k) = \rho_0(k) + \delta^\alpha \rho_1(k)$ and $Q = Q_0 + \delta^\beta Q_1$, où les puissances α et β sont pour l'instant laissées libres, et ne sont pas forcément entières (le résultat (7.31) pour Q nous avertit déjà que les développements aux petits s ne sont pas forcément analytiques).

Le point délicat vient de l'existence de deux limites à prendre dans les équations de Bethe (7.36) : on s'intéresse à leur développement pour $\delta \rightarrow 0$, dans une limite où les k_i se répartissent continûment sur un segment $[-Q_0, Q_0]$. Si on effectue naïvement le développement $\delta \sim 0$ sous la somme qui apparaît en prenant le logarithme de (7.36), les équations deviennent

$$\begin{aligned} k = 2\mathcal{P} \int_{-Q}^Q dk' \rho(k') \frac{1 - kk'}{k - k'} \\ + \frac{\delta^2}{6}(1 - k^2)\mathcal{P} \int_{-Q}^Q dk' \rho(k') \frac{(1 - k'^2)(k^2 + k'^2 + 2kk' - 4)}{(k - k')^3} + \mathcal{O}(\delta^4) \end{aligned} \quad (\text{H.2})$$

ce qui implique $\alpha = 2$ et donne

$$\mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \frac{\rho_1(k')}{k - k'} = -\frac{1}{12}\mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \rho_0(k') \frac{(1 - k'^2)(k^2 + k'^2 + 2kk' - 4)}{(k - k')^3}, \quad (\text{H.3})$$

en utilisant l'égalité

$$\int_{-Q_0}^{Q_0} dk \rho_1(k) = 0 \quad (\text{H.4})$$

qui provient de la condition $\int_{-Q}^Q dk \rho(k) = \rho$. Le second membre de (H.3) n'est pas défini mathématiquement (la partie principale est infinie), ce qui signifie que le développement

n'est pas valide. Il faut en réalité d'abord se placer dans une limite où les k_i se répartissent densément sur $[-Q_0, Q_0]$, et ne pas effectuer de développement en puissance de δ sous les sommes qui proviennent du logarithme de (7.36). On obtient l'équation

$$\delta k = 2\delta \mathcal{P} \int_{-Q}^Q dk' \rho(k') \frac{1 - kk'}{k - k'} + R(k, \delta) \quad (\text{H.5})$$

où le “reste” $R(k, \delta)$ a pour expression

$$R(k, \delta) = -k\delta + \mathcal{P} \int_{-Q}^Q dk' \rho(k') \frac{1}{i} \ln \left[-\frac{1 - 2 \cos \delta e^{ik\delta} + e^{i(k+k')\delta}}{1 - 2 \cos \delta e^{ik'\delta} + e^{i(k+k')\delta}} \right] \quad (\text{H.6})$$

Dans l'intégrant, l'argument du logarithme est de module unité. Il s'agit maintenant de déterminer un développement limité de cette expression. La première contribution à (H.6) est donnée par les ordres dominants ρ_0 et Q_0 de $\rho(k)$ et Q

$$R_0(k, \delta) = -k\delta + \mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \rho_0(k') \frac{1}{i} \ln \left[-\frac{1 - 2 \cos \delta e^{ik\delta} + e^{i(k+k')\delta}}{1 - 2 \cos \delta e^{ik'\delta} + e^{i(k+k')\delta}} \right] \quad (\text{H.7})$$

comme on l'a déjà remarqué, au premier ordre :

$$R_0(k, \delta) = 0 + o(\delta) \quad (\text{H.8})$$

Pour obtenir l'ordre suivant, il est plus facile d'analyser la dérivée de $R_0(k, \delta)$ par rapport à δ (la différentiabilité est assurée par (H.8)). On obtient une expression de la forme

$$\frac{\partial R_0(k, \delta)}{\partial \delta} = -k + \mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \rho_0(k') \Phi(k, k', \delta) \quad (\text{H.9})$$

où $\Phi(k, k', \delta)$ est une fonction réelle définie pour k et k' appartenant à $[-Q_0, Q_0]$, sans singularité tant que $\delta > 0$. Le tracé de $\Phi(k, k', \delta)$ (figure H.1) montre que la fonction développe une oscillation assez fine autour de $k = k'$ à mesure que δ s'approche de 0.

Loin de $k = k'$, $\Phi(k, k', \delta)$ ne dépend plus de δ pour de petites valeurs de δ . À l'inverse, autour de $k = k'$, Φ se comporte en

$$\Phi(k, k', \delta) \sim \delta^{-1} \tilde{\Phi}(k, (k - k')\delta^{-1}) \quad \text{pour } k \text{ fixé et } \delta \rightarrow 0, \quad (\text{H.10})$$

comme illustré sur la figure H.2.

On remarque que les deux extrema de Φ sont séparés d'une distance $\sim \delta$, mais qu'ils sont étalés autour de $k = k'$ sur une distance bien plus large, d'ordre $\sqrt{\delta}$. Cette différence de comportement nous suggère d'étudier séparément dans l'intégrale (H.9) sur les régions $[k - \sqrt{\delta}, k + \sqrt{\delta}]$ et $[-Q_0, k - \sqrt{\delta}] \cup [k + \sqrt{\delta}, Q_0]$, en effectuant le découpage

$$\int_{-Q_0}^{Q_0} dk' = \int_{\substack{|k'| < Q_0 \\ |k' - k| > \sqrt{\delta}}} dk' + \int_{\substack{|k'| < Q_0 \\ |k' - k| < \sqrt{\delta}}} dk' \quad (\text{H.11})$$

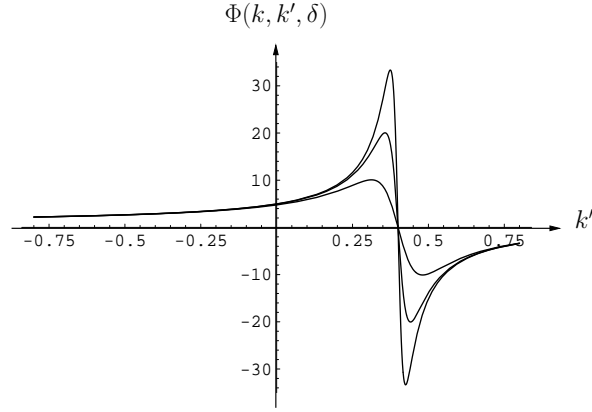


FIG. H.1 – Tracé de $\Phi(k, k', \delta)$ en fonction de k' pour $k = 0.4$, $\rho = 0.2$ et différentes valeurs de δ proches de 0. Ces tracés illustrent la manière dont Φ développe une oscillation de plus en plus forte autour de $k = k'$ pour $\delta \rightarrow 0$ (la plus faible de δ correspond à l'oscillation la plus forte, et inversement). Comme on l'indique sur la figure (H.2), les extrema de l'oscillation ont une hauteur $\sim \delta^{-1}$ et sont séparés d'une distance $\sim \delta$.

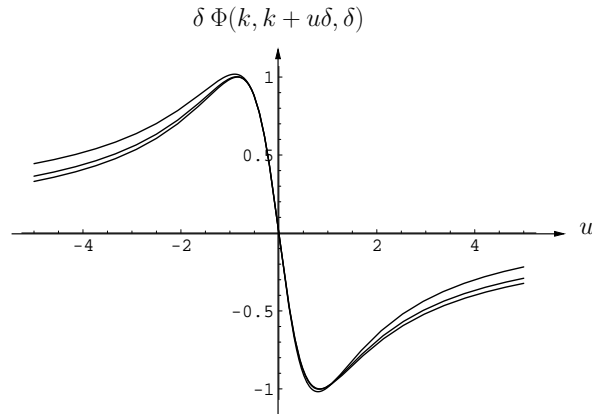


FIG. H.2 – Tracé de $\Phi(k, k', \delta)$ autour de $k = k'$ en fonction de $u = (k' - k)/\delta$ à $k = 0.4$ fixé, $\rho = 0.2$ et pour différentes valeurs de δ . Le changement de variable permet d'éliminer tout comportement dangereux de l'oscillation autour de $k = k'$.

Intégrale (H.9) pour $|k' - k| > \sqrt{\delta}$:

Le développement de Φ s'écrit

$$\Phi(k, k', \delta) = \frac{1 - kk'}{k - k'} - \frac{(1 - k^2)(1 - k'^2)(4 - (k + k')^2)}{2(k - k'^2)} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^4) \quad (\text{H.12})$$

En utilisant les primitives (valides pour $|k| < Q_0 \leq 1$, $|k'| < Q_0 \leq 1$)

$$\begin{aligned} \int dk' \frac{\sqrt{Q_0^2 - k'^2}}{k' - k} &= \sqrt{Q_0^2 - k^2} - k \arcsin \frac{k'}{Q_0} - \sqrt{Q_0^2 - k^2} \operatorname{argcosh} \frac{Q_0^2 - kk'}{Q|k - k'|} \\ \int dk' \frac{\sqrt{Q_0^2 - k'^2}}{k' - 1} &= \sqrt{Q_0^2 - k^2} - k \arcsin \frac{k'}{Q_0} + \sqrt{Q_0^2 - k^2} \arccos \frac{Q_0^2 - k'}{Q(1 - k')} \end{aligned} \quad (\text{H.13})$$

et la décomposition

$$\frac{1 - kk'}{(1 - k'^2)(k - k')} = \frac{1}{k - k'} + \frac{1}{2(1 + k')} - \frac{1}{2(1 - k')} \quad (\text{H.14})$$

on trouve

$$\int_{\substack{|k'| < Q_0 \\ |k' - k| > \sqrt{\delta}}} dk' \rho_0(k') \Phi(k, k', \delta) = -\frac{2k(1 - Q^2)}{\pi(1 - k^2)\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \sqrt{\delta} + \mathcal{O}(\delta^{3/2}) \quad (\text{H.15})$$

Intégrale (H.9) pour $|k' - k| < \sqrt{\delta}$:

Sur cet intervalle, on développe $\Phi(k, k', \delta)$ après le changement de variable $k' = k + u\delta$ de manière à extraire tout comportement dangereux de l'oscillation de Φ (cf. figure H.2)

$$\begin{aligned} \delta\Phi(k, k + u\delta, \delta)\rho_0(k + u\delta) &= -\frac{1}{\pi} \frac{u\sqrt{Q_0^2 - k^2}}{u^2 + (1 - k^2)} \\ &+ \frac{ku^2}{\pi} \frac{(1 - k^2)(1 + 2k^2 - 3Q_0^2) + (1 - Q_0^2)u^2}{(1 - k^2)\sqrt{Q_0^2 - k^2}(u^2 + (1 - k^2))} \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \end{aligned} \quad (\text{H.16})$$

Alors, grâce aux primitives

$$\begin{aligned} \int du \frac{u}{u^2 + (1 - k^2)^2} &= \frac{1}{2} \ln(u^2 + (1 - k^2)^2) \\ \int du u^2 \frac{(1 - k^2)(1 + 2k^2 - 3Q_0^2) + (1 - Q_0^2)u^2}{u^2 + (1 - k^2)} &= u \frac{(1 - k^2)^3 - (1 - Q_0^2)u^2}{u^2 + (1 - k^2)} \\ &+ (1 - k^2)^2 \arctan \frac{u}{1 - k^2} \end{aligned} \quad (\text{H.17})$$

on trouve

$$\int_{\substack{|k'| < Q_0 \\ |k' - k| < \sqrt{\delta}}} dk' \rho_0(k') \Phi(k, k', \delta) = \frac{2k(1 - Q^2)}{\pi(1 - k^2)\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \sqrt{\delta} - \frac{k(1 - k^2)}{\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \delta + \mathcal{O}(\delta^{3/2}) \quad (\text{H.18})$$

Dans l'addition des résultats (H.15) et (H.18), les termes en $\sqrt{\delta}$ s'éliminent. Finalement, en revenant à (H.8) et (H.9), on arrive à l'expression suivante

$$R_0(k, \delta) = \delta k - \frac{1}{2} \frac{k(1 - k^2)}{\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^{3/2}) \quad (\text{H.19})$$

dont on déduit $\alpha = 1$ (à comparer à la valeur $\alpha = 2$ du développement naïf). Ceci permet de déterminer l'équation vérifiée par la perturbation ρ_1 :

$$\mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \frac{\rho_1(k')}{k - k'} = \frac{k}{4\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \quad (\text{H.20})$$

Cette équation intégrale (à bornes finies) se résout par exemple en utilisant la méthode exposée par Tricomi [129, p.176]

$$\rho_1(k) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \left(Q_0 - k \operatorname{arctg} \frac{k}{Q_0} \right) + C \phi(k) \quad (\text{H.21})$$

La solution générale laisse la constante C devant $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{Q_0^2 - k^2}}$ est indéterminée. Cette fonction vérifie en effet :

$$\mathcal{P} \int_{-Q_0}^{Q_0} dk' \frac{\phi(k')}{k - k'} = 0 \quad (\text{H.22})$$

Dans notre contexte, C est déterminée grâce à la condition (H.4), qui implique $C = 0$. Au final, on trouve

$$\rho_1(k) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\sqrt{Q_0^2 - k^2}} \left(Q_0 - k \operatorname{arctg} \frac{k}{Q_0} \right) \quad (\text{H.23})$$

En rassemblant les résultats précédents dans (7.41), on arrive à l'expression suivante du développement de $\psi_K(s)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \psi_K(s) &= 2e^{-s} \int_{-Q}^Q dk \rho(k) \cos(\delta k) - 2\rho \\ &= -2\rho(1 - \rho)s + \frac{2^{7/2}}{3\pi} [\rho(1 - \rho)]^{3/2} |s|^{3/2} + \mathcal{O}(s^2) \end{aligned} \quad (\text{H.24})$$

On peut confirmer le résultat numériquement (figure 7.2) ou analytiquement dans l'approche du SEP par d'hydrodynamique fluctuante (paragraphe 7.3.3).

Annexe I

Théorie des perturbations pour un opérateur markovien

Nous détaillons dans cette annexe la construction originale d'une théorie de perturbation pour un opérateur markovien. La construction ressemble, sans y être équivalente, à la théorie de perturbation quantique d'un opérateur *hermitien*. Au lieu de tirer parti de la diagonalisabilité de l'opérateur (qui n'est pas assurée), on utilise ses propriétés markoviennes. On montre que dans le cas particulier où le bilan détaillé est vérifié, les deux constructions sont équivalentes.

I.1 Notations

On considère un système markovien décrit par des taux de transition entre configurations $W_0(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$. En posant $r_0(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W_0(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$, son opérateur d'évolution a pour éléments de matrice

$$\mathbb{W}_0(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = W_0(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - r_0(\mathcal{C})\delta(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \quad (\text{I.1})$$

À l'ensemble $\{\mathcal{C}\}$ des configurations on associe une base orthonormée $|\mathcal{C}\rangle$. On définit l'état de projection

$$|\mathbf{1}\rangle = \sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}\rangle \quad (\text{I.2})$$

Il vérifie $\langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_0 = 0$ ce qui montre que \mathbb{W}_0 admet un vecteur propre à droite de valeur propre nulle

$$|P_0\rangle = \sum_{\mathcal{C}} P_0(\mathcal{C}) |\mathcal{C}\rangle \quad \text{tel que} \quad \mathbb{W}_0 |P_0\rangle = 0 \quad (\text{I.3})$$

C'est l'état stationnaire, qui est unique si \mathbb{W}_0 est irréductible (ce que l'on suppose dans ce qui suit). Le théorème de Perron-Frobenius assure que 0 est la valeur propre maximale de \mathbb{W}_0 , que l'état propre $|P_0\rangle$ est unique et que ses coordonnées sont toutes de même signe (que l'on choisit positif). On normalise $|P_0\rangle$ suivant $\langle \mathbf{1} | P_0 \rangle = 1$.

I.2 Perturbation au premier ordre

On s'intéresse à la perturbation de l'état "fondamental" $|P_0\rangle$ de \mathbb{W}_0 par un opérateur \mathbb{W}_1 :

$$\mathbb{W} = \mathbb{W}_0 + s\mathbb{W}_1 \quad (\text{I.4})$$

$$|P\rangle = |P_0\rangle + s|P_1\rangle + \frac{1}{2}s^2|P_2\rangle + \dots \quad (\text{I.5})$$

$$\lambda = 0 + s\lambda_0^{(1)} + \frac{1}{2}s^2\lambda_0^{(2)} + \dots \quad (\text{I.6})$$

L'équation aux valeurs propres $\mathbb{W}|P\rangle = \lambda|P\rangle$ donne au premier ordre en s l'équation sur $|P_1\rangle$

$$\mathbb{W}_0|P_1\rangle = \lambda_0^{(1)}|P_0\rangle - \mathbb{W}_1|P_0\rangle \quad (\text{I.7})$$

Alors

$$\boxed{\lambda_0^{(1)} = \langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_1 | P_0 \rangle} \quad (\text{I.8})$$

Contrairement au cas quantique, l'orthogonalité ne joue pas de rôle dans la détermination de la perturbation du fondamental. La seule chose importante est l'existence et l'unicité du fondamental.

I.3 Perturbation au second ordre

Au second ordre, l'équation aux valeurs propres donne une équation sur $|P_2\rangle$

$$\mathbb{W}_0|P_2\rangle = 2\lambda_0^{(1)}|P_1\rangle + \lambda_0^{(2)}|P_0\rangle - 2\mathbb{W}_1|P_1\rangle \quad (\text{I.9})$$

On en déduit l'expression de $\lambda_0^{(2)}$ en fonction de $|P_1\rangle$

$$\boxed{\frac{1}{2}\lambda_0^{(2)} = \langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_1 | P_1 \rangle - \langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_1 | P_0 \rangle \langle \mathbf{1} | P_1 \rangle} \quad (\text{I.10})$$

L'équation (I.7) qui porte sur $|P_1\rangle$ n'a pas une solution unique, car \mathbb{W}_0 a une valeur propre nulle et n'est donc pas inversible. Si $|P_1\rangle$ est une solution particulière, toutes les solutions sont en fait de la forme :

$$|P_1\rangle + \alpha|P_0\rangle \quad (\text{I.11})$$

Toutefois, quelle que soit la solution choisie, l'expression (I.10) de $\lambda_0^{(2)}$ reste inchangée.

I.4 Cas des taux de transition vérifiant le bilan détaillé

Lorsque le processus markovien non perturbé décrit une évolution vers un état d'équilibre $P_0(\mathcal{C})$, les taux vérifient le bilan détaillé

$$P_0(\mathcal{C})W_0(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = P_0(\mathcal{C}')W_0(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \quad (\text{I.12})$$

qui implique que

$$P_0(\mathcal{C})^{\frac{1}{2}} W_0(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P_0(\mathcal{C}')^{-\frac{1}{2}} = P_0(\mathcal{C}')^{\frac{1}{2}} W_0(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P_0(\mathcal{C})^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I.13})$$

En désignant par P_0 la matrice diagonale d'éléments $P_0(\mathcal{C})\delta(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$, on voit que

$$P_0^{-\frac{1}{2}} \mathbb{W}_0 P_0^{\frac{1}{2}} \text{ est une matrice symétrique} \quad (\text{I.14})$$

Elle est donc diagonalisable dans une base orthonormale $\{|X_n\rangle\}$. Par unicité de l'état fondamental, on a en particulier

$$|X_0\rangle = |P_0^{\frac{1}{2}}\rangle = \sum_{\mathcal{C}} P_0(\mathcal{C})^{\frac{1}{2}} |\mathcal{C}\rangle \quad (\text{I.15})$$

La décomposition sur les vecteurs propres s'écrit

$$P_0^{-\frac{1}{2}} \mathbb{W}_0 P_0^{\frac{1}{2}} = \sum_{\mathcal{C}} \lambda_n^{(0)} |X_n\rangle \langle X_n| \quad (\text{I.16})$$

Pour revenir à l'opérateur d'évolution initial, on pose $|Y_n\rangle = P_0^{-\frac{1}{2}} |X_n\rangle$ et $\langle Z_n| = \langle X_n| P_0^{\frac{1}{2}}$, de sorte que

$$\boxed{\mathbb{W}_0 = \sum_{\mathcal{C}} \lambda_n^{(0)} |Y_n\rangle \langle Z_n|} \quad \text{avec :} \quad \langle Z_n | Y_m \rangle = \langle Y_n | Z_m \rangle = \delta_{n,m} \quad (\text{I.17})$$

D'après (I.15), pour $n = 0$ les vecteurs $|Y_n\rangle$ et $\langle Z_n|$ reprennent des valeurs connues

$$|Y_0\rangle = |P_0\rangle \quad \text{et} \quad \langle Z_0| = \langle \mathbf{1}| \quad (\text{I.18})$$

Enfin, il est facile de voir réciproquement que tout opérateur d'évolution vérifiant les relations (I.17) vérifie une relation de bilan détaillé.

Lorsque le bilan détaillé est vérifié, l'équation (I.7) sur la perturbation $|P_1\rangle$ peut se résoudre en projetant sur les vecteur $|Y_n\rangle$. On obtient

$$|P_1\rangle = - \sum_{n \geq 1} \frac{\langle Z_n | \mathbb{W}_1 | P_0 \rangle}{\lambda_n^{(0)}} |Y_n\rangle \quad (\text{I.19})$$

Il est alors possible de trouver l'expression de la perturbation d'ordre deux de l'état fondamental

$$\boxed{\frac{1}{2} \lambda_0^{(2)} = - \sum_{n \geq 1} \frac{\langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_1 | Y_n \rangle \langle Z_n | \mathbb{W}_1 | P_0 \rangle}{\lambda_n^{(0)}}} \quad (\text{I.20})$$

Cette expression est valide même si $P_0^{-\frac{1}{2}} \mathbb{W}_1 P_0^{\frac{1}{2}}$ n'est pas symétrique. Si $P_0^{-\frac{1}{2}} \mathbb{W}_1 P_0^{\frac{1}{2}}$ est symétrique, on retrouve l'expression standard de la théorie quantique des perturbations

$$\frac{1}{2} \lambda_0^{(2)} = - \sum_{n \geq 1} \frac{|\langle \mathbf{1} | \mathbb{W}_1 | Y_n \rangle|^2}{\lambda_n^{(0)}} \quad (\text{I.21})$$

Bibliographie

- [1] P. Allegrini, J.F. Douglas, S.C. Glotzer, Phys. Rev. E **60** 5714 (1999), *Dynamic entropy as a measure of caging and persistent particle motion in supercooled liquids*
- [2] J.B. Anderson, J. Chem. Phys. **63** 1499 (1975), *A random-walk simulation of the Schrödinger equation : H_3^+*
- [3] A. Andreanov, G. Biroli and A. Lefèvre, J. Stat. Mech. (2006) P07008, *Dynamical field theory for glass-forming liquids, self-consistent resummations and time-reversal symmetry*
- [4] A. Andreanov, G. Biroli, J.-P. Bouchaud and A. Lefèvre, Phys. Rev. E **74** 030101 (2006) *Field theories and exact stochastic equations for interacting particle systems*
- [5] G. Barkema, discussion privée
- [6] R. Bausch, H.K. Janssen and H. Wagner, Z. Phys. B **24** 113 (1976), *Renormalized field-theory of critical dynamics*
- [7] R.J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, 1990)
- [8] J.-P. Bouchaud, A. Comtet, A. Georges, and P. Le Doussal, Ann. Phys., NY, **201** 285 (1990), *Classical diffusion of a particle in a one-dimensional random force field*
- [9] H. van Beijeren, R. Kutner and H. Spohn, Phys. Rev. Lett. **54** 2026 (1985), *Excess noise for driven diffusive systems*
- [10] H. van Beijeren and J. R. Dorfman, Phys. Rev. Lett. **74**, 4412 (1995), *Lyapunov Exponents and Kolmogorov-Sinai Entropy for the Lorentz Gas at Low Densities*
- [11] H. van Beijeren, J. R. Dorfman, H. A. Posch and Ch. Dellago, Phys. Rev. E **56**, 5272 (1997), *Kolmogorov-Sinai entropy for dilute gases in equilibrium*
- [12] H. van Beijeren and J. R. Dorfman, J. Stat. Phys. **108**, 767 (2002), *A note on the Ruelle pressure for a dilute disordered Sinai billiard*
- [13] R. Benzi, G. Paladin, G. Parisi and A. Vulpiani, J. Phys. A **18** 2157 (1985), *Characterisation of intermittency in chaotic systems*
- [14] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Phys. Rev. Lett. **94** 030601 (2005), *Current fluctuations in stochastic lattice gases*
- [15] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, J. Stat. Phys. **123** 237 (2006), *Non equilibrium current fluctuations in stochastic lattice gases*

- [16] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, *Large deviations of the empirical current in interacting particle systems*
- [17] H. Bethe, Z. Phys. **71** 205 (1931), *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*
- [18] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92** 180601 (2004), *Current fluctuations in non-equilibrium diffusive systems : an additivity principle*
- [19] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. E **72** 066110 (2005), *Distribution of current in non-equilibrium diffusive systems and phase transitions*
- [20] T. Bodineau and B. Derrida, J. Stat. Phys. **123** 277 (2006), *Current large deviations for asymmetric exclusion processes with open boundaries*
- [21] C. Bustamante, J.C. Macosko, G.J. Wuite, Nat. Rev. Mol. Cell. Biol. (2000) **1** 130, *Grabbing the cat by the tail : manipulating molecules one by one.*
- [22] C. Bustamante, J. Liphardt and F. Ritort, Physics Today **58** (7), 43 (2005), *The non-equilibrium thermodynamics of small systems*
- [23] H.B.G. Casimir, Rev. Mod. Phys **17** 343 (1945), *On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility*
- [24] S. Ciliberto and C. Laroche, J. Physique IV **8** Pr6-215 (1998), *An experimental test of the Gallavotti-Cohen fluctuation theorem*
- [25] S. Ciliberto, N. Garnier, J. F. Pinton and R. Ruiz-Chavarria, Physica A **340** 240 (2004), *Experimental test of the Gallavotti-Cohen fluctuation theorem in turbulent flows*
- [26] G. E. Crooks, J. Stat. Phys. **90** 1481 (1998), *Nonequilibrium Measurements of Free Energy Differences for Microscopically Reversible Markovian Systems*
- [27] G. E. Crooks, Phys. Rev. E **60** 2721 (1999), *Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences*
- [28] G. E. Crooks, Phys. Rev. E **61** 2361 (2000), *Path-ensemble averages in systems driven far from equilibrium*
- [29] D. S. Dean, J. Phys. A **29** L613 (1996), *Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes*
- [30] B. Derrida, E. Domany, D. Mukamel, J. Stat. Phys. **69**, 667-687 (1992), *An exact solution of the one dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*
- [31] B. Derrida, M.R. Evans, V. Hakim, V. Pasquier, J. Phys. A **26**, 1493 (1993), *Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation*
- [32] B. Derrida, K. Mallick, J. Phys. A **30** 1031-1046 (1997), *Exact diffusion constant for the one dimensional partially asymmetric exclusion model*
- [33] B. Derrida, Phys. Rep. **301**, 65 (1998), *An exactly soluble non-equilibrium system : the asymmetric simple exclusion process*

- [34] B. Derrida and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **80**, 209 (1998), *Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process*
- [35] B. Derrida and C. Appert, J. Stat. Phys., **94**, 1-30 (1999), *Universal large deviation function of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one dimension*
- [36] B. Derrida, J.L. Lebowitz, E.R. Speer, Phys. Rev. Lett. **87**, 150601 (2001), *Free Energy Functional for Nonequilibrium Systems : an Exactly Soluble Case*
- [37] B. Derrida, J.L. Lebowitz, E.R. Speer, J. Stat. Phys. **110**, 775-810 (2003), *Exact large deviation functional of a stationary open driven diffusive system : the asymmetric exclusion process*
- [38] B. Derrida, B. Douçot, P.E. Roche, J. Stat. Phys. **115**, 717-748 (2004), *Current fluctuations in the one dimensional symmetric exclusion process with open boundaries*
- [39] C. Deroulers and T. Monasson, Phys. Rev E **69** 016126 (2004), *Field theoretic approach to metastability in the contact process*
- [40] R. Dickman and R. Vidigal, J. Phys. A **35** 1147 (2002), *Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*
- [41] C. De Dominicis, J. Phys. (France) Colloq. **37** C247 (1976), *Techniques de renormalisation de la théorie des champs et dynamique des phénomènes critiques*
- [42] M. Doi, J. Phys. A **9** 1465 (1976), *Second quantization representation for classical many-particle system*
- [43] M. D. Donsker, S. R. Varadhan, *Asymptotic evaluation of certain Markov process expectations for large time, I.*, Comm. Pure Appl. Math. **28** :1 (1975).
- [44] J.R. Dorfman, M.H. Ernst and D. Jacobs, J. Stat. Phys. **81**, 497 (1995), *Dynamical chaos in the Lorentz lattice gas*
- [45] J.R. Dorfman, *An introduction to chaos in nonequilibrium statistical mechanics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999)
- [46] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson, Proc. R. Soc. London Ser. A **381**, 17 (1982), *The Surface Statistics of a Granular Aggregate*
- [47] A. Einstein, Ann. d. Phys. **17** 549 (1905), *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*
- [48] R.S. Ellis, *Entropy, large deviations, and Statistical Mechanics*, (Springer-Verlag, New York, 1985)
- [49] F.H.L. Essler, V. Rittenberg, J. Phys. A **29**, 3375 (1996), *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*
- [50] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss, Phys. Rev. Lett. **71**, 2401 (1993), *Probability of second law violations in shearing steady states*
- [51] D. J. Evans and D. J. Searles, Phys. Rev. E **50**, 1645 (1994), *Equilibrium microstates which generate second law violating steady states*

- [52] D.J. Evans and D.J. Searles, Adv. Phys. **51**, 1529 (2002), *The Fluctuation Theorem*
- [53] H. Fogedby, A.B. Eriksson and L.V. Mikheev, Phys. Rev. Lett. **75** 1883 (1995), *Continuum Limit, Galilean Invariance, and Solitons in the Quantum Equivalent of the Noisy Burgers Equation*
- [54] D. Forster, D.R. Nelson D R, and M.J. Stephen, Phys. Rev. A **16** 732 (1977), *Large-distance and long-time properties of a randomly stirred fluid*
- [55] S. Franz and M.A. Virasoro, J. Phys. A : Math. Gen. **33**, 391 (2000), *Quasi-equilibrium interpretation of ageing dynamics*
- [56] G.H. Fredrickson and H.C. Andersen, Phys. Rev. Lett. **53**, 1244 (1984), *Kinetic Ising-model of the glass-transition*
- [57] G.H. Fredrickson and H.C. Andersen, J. Chem. Phys. **83** 5822 (1985), *Facilitated kinetic Ising-models and the glass- transition*
- [58] G. Gallavotti and E.G.D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **74**, 2694 (1995), *Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics*
- [59] G. Gallavotti and E.G.D. Cohen, J. Stat. Phys **80**, 931 (1995), *Dynamical ensembles in stationary states*
- [60] N. Garnier and S. Ciliberto, Phys. Rev. E **71** 060101(R) (2005), *Nonequilibrium fluctuations in a resistor*
- [61] P. Gaspard and G. Nicolis, Phys. Rev. Lett. **65**, 1693 (1990), *Transport properties, Lyapunov exponents, and entropy per unit time*
- [62] P. Gaspard and X.-J. Wang, Phys. Rep. **235** 291 (1993), *Noise, chaos, and (ϵ, τ) -entropy per unit time*
- [63] P. Gaspard, J. Stat. Phys. **88**, 1215, (1997), *Entropy production in open volume-preserving systems*
- [64] P. Gaspard, *Chaos, scattering and statistical mechanics*, Cambridge Nonlinear Science Series vol. 9 (Cambridge UP, 1998).
- [65] P. Gaspard, J. Stat. Phys. **117**, 599, (2004), *Time-Reversed Dynamical Entropy and Irreversibility in Markovian Random Processes*
- [66] P. Gaspard, J. Chem. Phys. **120** 8898 (2004), *Fluctuation theorem for nonequilibrium reactions*
- [67] C. Giardinà, J. Kurchan and L. Peliti, Phys. Rev. Lett. **96**, 120603 (2006), *Direct evaluation of large-deviation functions*
- [68] P. Grassberger, discussion privée.
- [69] P. Grassberger, R. Badii and A. Politi, J. Stat. Phys **51** 135 (1988), *Scaling laws for invariant measures on hyperbolic and nonhyperbolic attractors*
- [70] L. H. Gwa and H. Spohn, Phys. Rev. Lett. **68** 725 (1992), *Six-vertex model, roughened surfaces, and an asymmetric spin Hamiltonian*

- [71] B. I. Halperin, P. C. Hohenberg and S.-k. Ma, Phys. Rev. B **10** 139 (1974), *Renormalization-group methods for critical dynamics : I. Recursion relations and effects of energy conservation*
- [72] T.E. Harris, Ann. Probab. **2** 969 (1974), *Contact Interactions on a Lattice*
- [73] H. Hinrichsen, Adv. Phys. **49**, 815 (2000), *Nonequilibrium Critical Phenomena and Phase Transitions into Absorbing States*
- [74] T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940), *Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet*
- [75] J. Honkonen, J. Phys. A : Math. Gen. **24** L1235 (1991), *Renormalization group analysis for superdiffusion in random velocity fields*
- [76] R.L. Jack, J.P. Garrahan, D. Chandler, J. Chem. Phys. **125** 184509 (2006), *Space-time thermodynamics and subsystem observables in a kinetically constrained model of glassy systems* (see figure 2 in [cond-mat/cond-mat/0604068v1])
- [77] R.L. Jack, P. Mayer and P. Sollich, J. Stat. Mech. (2006) P03006, *Mappings between reaction-diffusion and kinetically constrained systems : $A + A \leftrightarrow A$ and the FA model have upper critical dimension $d_c = 2$*
- [78] J. Jäckle and S. Eisinger, Z. Phys. B **84**, 115 (1991), *A hierarchically constrained kinetic Ising-model*
- [79] H.K. Janssen, Z. Phys. B **23** 377 (1976), *Lagrangian for classical field dynamics and renormalization group calculations of dynamical critical properties*
- [80] H.K. Janssen, in *Dynamical critical phenomena and related topics (Lecture notes in physics vol 104)* ed C P Enz (Berlin : Springer, 1979), *Field-theoretic methods applied to critical dynamics*
- [81] H.K. Janssen and B. Schmittmann, Z. Phys. B – Condensed Matter, **63** 517 (1986), *Field theory of long time behaviour in driven diffusive systems*
- [82] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997), *Nonequilibrium equality for free energy differences*
- [83] P. Jordan und E. Wigner, Z. Phys. **47** 631 (1928), *Über das Paulische Äquivalenzverbot*
- [84] A.N. Jordan, E.V. Sukhorukov, S. Pilgram, J. Math. Phys. **45** 4386 (2004), *Fluctuation statistics in networks : A stochastic path integral approach*
- [85] N. van Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry* (North-Holland, 1992)
- [86] M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56** 889 (1986), *Dynamic Scaling of Growing Interfaces*
- [87] D. Kim, Phys. Rev. E **52** 3512 (1995), *Bethe ansatz solution for crossover scaling functions of the asymmetric XXZ chain and the KPZ-type growth model*
- [88] J. R. Klauder and B.-S. Skagerstam, *Coherent States – Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, Singapore, 1985)

- [89] A. N. Kolmogorov, Dokl. Acad. Sci. USSR **119**, 861 (1958), *A new metric invariant of transient dynamical systems and automorphisms in Lebesgue spaces* ; Dokl. Acad. Sci. USSR **124**, 754 (1959), *Entropy per unit time as a metric invariant of automorphisms*
- [90] J. Kurchan, J. Phys. A **31**, 3719 (1998), *Fluctuation theorem for stochastic dynamics*
- [91] J. Kurchan, [cond-mat/0612397] Gallavotti-Cohen theorem, Chaotic Hypothesis and the zero-noise limit
- [92] A. Latz, H. van Beijeren and J. R. Dorfman, Phys. Rev. Lett. **78**, 207 (1997), *Lyapunov spectrum and the conjugate pairing rule for a thermostatted random Lorentz gas : kinetic theory*
- [93] J.L. Lebowitz and H. Spohn, J. Stat. Phys. **95**, 333 (1999), *A Gallavotti-Cohen Type Symmetry in the Large Deviation Functional for Stochastic Dynamics*
- [94] K.-t. Leung and J.L. Cardy, J. Stat. Phys. **44** 567 (1986), *Field theory of critical behavior in a driven diffusive system*
- [95] T.C. Lubensky, *Thermal and geometrical critical phenomena in random systems*, in Balian, Maynard, and Toulouse eds., *Ill Condensed Matter, Les Houches XXXI* (North-Holland, Amsterdam, 1979),
- [96] C. Maes, J. Stat. Phys. **95**, 367 (1999), *The fluctuation theorem as a Gibbs property*
- [97] C. Maes, K. Netočný, B. Shergelashvili, *A selection of nonequilibrium issues*, Lecture notes from the 5th Prague Summer School on Mathematical Statistical Mechanics (2006), [math-ph/0701047]
- [98] L.-M. Martinez and C. A. Angell, Nature **410** 663 (2001), *A thermodynamic connection to the fragility of glass-forming liquids*
- [99] J.F.F. Mendes and E.J.S. Lage, J. Stat. Phys., **64**, 653 (1991), *Dynamics of the infinite ranged Potts model*
- [100] M.A. Muñoz, A. Gabrielli, H. Inaoka and L. Pietronero, Phys. Rev. E, **57** 4354 (1998), *Hierarchical model of slow constrained dynamics*
- [101] N. I. Muskhelishvili, *Singular integral equations*, 1953, Noordhoff Ed., Groningen (Holland)
- [102] L. Onsager, Phys. Rev. **37** 405 (1930), *Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I*
- [103] L. Onsager, Phys. Rev. **38** 2265 (1931), *Reciprocal Relations in Irreversible Processes. II*
- [104] L. Onsager, Phys. Rev. **91** 1505 (1953), *Fluctuations and irreversible processes*
- [105] L. Peliti, J. Phys. (Paris), **46** 1469 (1985), *Path integral approach to birth-death processes on a lattice*
- [106] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and their Applications* (Springer-Verlag, Berlin, 1986)

- [107] S. Pilgram, A.N. Jordan, E.V. Sukhorukov, M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **90** 206801 (2003), *Stochastic path integral formulation of full counting statistics*
- [108] Z. Rácz and R.K.P. Zia, Phys. Rev. E **49** 139 (1994), *Two-temperature kinetic Ising model in one dimension : Steady-state correlations in terms of energy and energy flux*
- [109] J. Reiter, F. Mauch and J. Jäckle, Physica A **184**, 493 (1992), *Blocking transitions in lattice spin models with directed kinetic constraints*
- [110] F. Ritort, in Poincaré Seminar **2**, 195-229 (Birkhäuser Verlag, Basel, 2003) [[cond-mat/0401311](#)], *Work fluctuations, transient violations of the second law and free-energy recovery methods : Perspectives in Theory and Experiments*
- [111] F. Ritort and P. Sollich, Adv. Phys. **52** 219 (2003), *Glassy dynamics of kinetically constrained models*
- [112] D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism*, 1978, Addison-Wesley, Reading (Mass.).
- [113] Th.W. Ruijgrok and J.A. Tjon, Physica **65**, 539 (1973), *Critical slowing down and nonlinear response in an exactly solvable stochastic model*
- [114] L. Santen and W. Krauth, Nature **405** 550 (2000), *Absence of thermodynamic phase transition in a model glass former*
- [115] B. Schmittmann B and R.K.P. Zia, *Statistical Mechanics of Driven Diffusive Systems (Phase Transitions and Critical Phenomena vol 17)* ed Domb C and Lebowitz J L (London : Academic Press, 1995)
- [116] B. Schmittmann and R.K.P. Zia, *Proc. IXth Int. Summer School on Fundamental Problems in Statistical Mechanics* ed H van Beijeren *Phys. Rep.* **301** 45 (1998), *Driven diffusive systems : an introduction and recent developments*
- [117] B. Schmittmann and F. Schmüser, Phys. Rev. E **66** 046130 (2002), *Exact stationary correlations for a far-from-equilibrium spin chain*
- [118] R.H. Schonmann, J. Stat. Phys. **58**, 1239 (1990), *Critical points of two-dimensional bootstrap percolation-like cellular automata*
- [119] G.M. Schütz, *Exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* **19**, 1 - 251, C. Domb and J. Lebowitz Eds., (Academic Press, London, 2000).
- [120] Ya.G. Sinai, Dokl. Acad. Sci. USSR **124**, 768 (1959), *On the concept of entropy for a dynamic system*
- [121] H. G. Solari, J. Math. Phys. **28** 1097, *Semiclassical treatment of spin system by means of coherent states*
- [122] H. Spohn, J. Phys. A **16** 4275 (1983), *Long range correlations for stochastic gases in a non-equilibrium steady state*
- [123] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particle* (Springer-Verlag, 1991)

- [124] M. Stone, K.-S. Park and A. Garg, J. Math. Phys. **41**, 8025 (2000), *The semiclassical propagator for spin coherent states*
- [125] J. Tailleur, S. Tănase-Nicola and Jorge Kurchan, J. Stat. Phys. **122**, 557 (2006), *Kramers Equation and Supersymmetry*
- [126] J. Tailleur and J. Kurchan, Nature Physics **3**, 203 (2007), *Probing rare physical trajectories with Lyapunov weighted dynamics*
- [127] U.C. Täuber U C, [cond-mat/0511743], to appear in : *Proc. Int. Summer School Ageing and the Glass Transition (Lecture notes in physics)* eds M. Henkel, M. Pleimling and R. Sanctuary (Berlin : Springer, 2007), *Field theory approaches to nonequilibrium dynamics*
- [128] C. Toninelli, G. Biroli and D.S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **96**, 035702 (2006), *Jamming Percolation and Glass Transitions in Lattice Models*
- [129] F.G. Tricomi, *Integral equations* (Interscience Publishers, New York, 1957)
- [130] G. M. Wang, E. M. Sevick, E. Mittag, D. J. Searles, and D. J. Evans, Phys. Rev. Lett. **89**, 050601 (2002), *Experimental Demonstration of Violations of the Second Law of Thermodynamics for Small Systems and Short Time Scales*
- [131] S. Whitelam, L. Berthier, J.P. Garrahan, Phys. Rev. Lett. **92** 185705 (2004), *Dynamic criticality in glass-forming liquids*
- [132] F. van Wijland, Phys. Rev. E **63** 022101 (2001), *Field theory for reaction-diffusion processes with hard-core particles*
- [133] F. van Wijland and Z. Rácz, J. Stat. Phys. **118** 27 (2005), *Large deviations in weakly interacting boundary driven lattice gases*
- [134] F. Zamponi, [cond-mat/0612019], *Is it possible to experimentally verify the fluctuation relation ? A review of theoretical motivations and numerical evidence.*
- [135] E.D. Zanotto, Am. J. Phys. **66** 392 (1998), *Do cathedral glasses flow ?*

Publications

Revues à comité de lecture

- P1** V. Lecomte, Z. Rácz and F. van Wijland, J. Stat. Mech. P02008 (2005), *Energy flux distribution in a two-temperature Ising model*
- P2** V. Lecomte, C. Appert-Rolland and F. van Wijland, Phys. Rev. Lett. **95** 010601 (2005), *Chaotic properties of systems with Markov dynamics*
- P3** V. Lecomte, C. Appert-Rolland and F. van Wijland, J. Stat. Phys. **127** 51 (2007), *Thermodynamic formalism for systems with Markov dynamics*
- P4** V. Lecomte, U.C. Täuber and F. van Wijland, J. Phys. A : Math. Theor., **40** 1447 (2007), *Current distribution in systems with anomalous diffusion : renormalisation group approach*
- P5** V. Lecomte and J. Tailleur, J. Stat. Mech., P03004 (2007), *A numerical approach to large deviations in continuous-time*
- P6** J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, Phys. Rev. Lett. **98** 195702, *Dynamic first-order transition in kinetically constrained models of glasses*

Annales de conférences

- P7** V. Lecomte, C. Appert-Rolland and F. van Wijland, compte rendu de la conférence *Work, Dissipation and Fluctuations in Nonequilibrium Physics* (Bruxelles, 2006), C. R. Physique (Paris), **8**, 609 (2007) *Thermodynamic formalism and large deviation functions in continuous time Markov dynamics*

Résumé

La thermodynamique étudie les fluctuations des configurations adoptées par un système, mais ce point de vue n'est pas adapté aux situations où les fluctuations des histoires sont importantes.

Dans une première partie, nous adaptons le formalisme de Ruelle au cas des systèmes markoviens en temps continu. Il apparaît que tous les concepts de la théorie (fonction de partition dynamique, pression topologique) s'obtiennent comme des fonctions de grandes déviations de certaines observables extensives en temps. Nous développons une approche en champ moyen, basée sur la construction d'une énergie libre dynamique à la Landau-Ginzburg, dont découlent toutes les observables de la théorie. Nous exposons également un algorithme qui permet de les évaluer en dimension finie. L'application de ces méthodes à des modèles de verres montre que l'état stationnaire de ces systèmes est situé exactement au point d'une transition de phase dynamique du premier ordre (entre deux phases active et inactive) ce qui justifie l'image heuristique de coexistence de phase dynamique proposée pour décrire ces modèles.

La seconde partie traite spécifiquement des fluctuations de courant dans des systèmes pour lesquels peu de résultats généraux sont disponibles : (i) un modèle de spins très loin de l'équilibre au contact de deux bains thermiques, (ii) un modèle d'exclusion symétrique en dimension 1, (iii) des exemples de systèmes superdiffusifs. Dans tous ces systèmes, nous déterminons le comportement en loi de puissance de la fonction de grandes déviations et, lorsque c'est possible, la fonction de grandes déviations elle-même ou les fonctions d'échelles qui correspondent à différents régimes de courant.

Summary

Thermodynamics is aimed at studying the fluctuations of configurations in physical systems. This approach is not well fitted to systems where the fluctuations of the histories followed by the system are also important.

In a first part, we translate the Ruelle formalism to the case of continuous-time Markov systems. The main tools of the theory (dynamical partition function, topological pressure) appear as large deviation functions of well-defined time-extensive observables. We develop a mean-field approach based on a Landau-Ginzburg dynamical free energy construction, from which the main objects of the theory are deduced in a natural way. We also present an algorithm which can be used to evaluate them in finite dimension. In this context, we show that the steady state of glass formers takes place at a first-order coexistence line between active and inactive dynamical phases, which justifies the heuristic picture of dynamical coexistence of phase proposed to describe these models.

The second part deals specifically with current fluctuations in systems where few general results had been obtained (i) a spin model driven very far from equilibrium; (ii) the symmetric exclusion process in dimension one; (iii) examples of superdiffusive systems. In these systems, we determine the power behavior and, when possible, the scaling functions of the current large deviation function, which correspond to different transport regimes in the system.